



Anton Fedak

**Estudo e Optimização do Processo de Condensação
do Cloreto de Vinilo**



Anton Fedak

Estudo e Optimização do Processo de Condensação do Cloreto de Vinilo

Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química, realizada sob a orientação científica do Doutor Francisco Avelino da Silva Freitas, Professor auxiliar do Departamento de Química da Universidade de Aveiro, e do Doutor Arnaldo José Carvalho Tomás, Engenheiro Químico e Chefe de Divisão do Desenvolvimento da Companhia Industrial das Resinas Sintéticas, Lda.

o júri

presidente

Prof. Doutor Carlos Manuel Santos Silva

Professor auxiliar do Departamento de Química da Universidade de Aveiro

Eng.º Alexandre Manuel de Afonso Henriques

Director do Departamento de Produção da Companhia Industrial de Resinas Sintéticas, Lda

Prof. Doutor Francisco Avelino da Silva Freitas

Professor auxiliar do Departamento de Química da Universidade de Aveiro

Doutor Arnaldo José Carvalho Tomás

Chefe do Departamento de Desenvolvimento da Companhia Industrial de Resinas Sintéticas, Lda

Agradecimentos

Em primeiro lugar, agradeço aos meus pais pela oportunidade que tive de tirar o curso superior. Agradeço também toda a minha família e a minha querida namorada por todo o apoio, conselhos e incentivo que sempre me deram e que me ajudou a chegar aqui.

À todos os meus amigos de Engenharia Química da Universidade de Aveiro, especialmente os da minha matrícula, que sempre me ajudaram, quando foi necessário, nos meus estudos.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Francisco Avelino Freitas pelas proveitosas contribuições no decorrer deste trabalho e pela paciência que teve comigo.

Agradeço ao Eng.º Pedro Gonçalves por ter seleccionado a mim na entrevista e por me ter concedido a oportunidade de estagiar na CIRESLda e desenvolver minha tese/projecto de mestrado em ambiente industrial. Foram nove meses inesquecíveis.

Um grande obrigado ao Doutor Arnaldo José Carvalho Tomás por toda a orientação científica que me deu e pela constante disponibilidade de me ajudar na realização deste trabalho.

Ao António Vigário pela constante disponibilidade e ajuda prestadas. À toda a equipa de operadores de PS2 por todo o conhecimento que partilharam comigo, tão importante para um bom entendimento do funcionamento das instalações de processo.

Aos analistas e aos estagiários do Dep. Desenvolvimento e do Dep. Manutenção. Agradeço toda a ajuda prestada e, mais importante, bom companheirismo nas horas de almoço.

palavras-chave

2-cloroeteno, Cloreto de Vinilo, Monomero, Poli(Cloreto de Vinilo), Condensação, Permutadores de Calor, Carcaça e feixe de Tubos, *TEMA*.

resumo

A optimização de processos químicos é uma prática comum e constantemente utilizada na indústria. O objectivo da optimização é melhorar o desempenho de um dado equipamento ou instalação. A CIRES,Lda possui uma unidade de condensação de VCM composta por 2 estágios, com o total de 3 condensadores do tipo Carcaça e feixe de Tubos, cuja corrente de saída contém na sua composição cerca de 55%(m/m) de VCM. Este trabalho tem como objectivo melhorar e optimizar o desempenho da instalação de condensação com o consequente reaproveitamento de maior quantidade de VCM.

Foram estudadas várias alternativas propostas e concluiu-se que a melhor alternativa, do ponto de vista do desempenho e económico, é a substituição do actual fluido de refrigeração do segundo estágio da unidade de condensação, a água refrigerada (RW) a 8°C, pela solução aquosa de etileno-glicol a -30°C. A simulação demonstrou que a operação com o novo fluido de refrigeração permite diminuir a quantidade de VCM na corrente de saída em 38%(m/m). Este ganho representa um custo adicional estimado de 0,007€ por 1kg de VCM extra condensado.

Além disso, dimensionou-se um novo condensador necessário para operar a -30°C, cuja área de transferência de calor calculada é de 7m².

keywords

2-chloroethene, Vinyl Chloride, Monomer, Polyvinyl Chloride, Condensation, Heat Exchangers, Shell and Tube, *TEMA*.

abstract

The optimization of chemical processes is a common and constantly used practice in the industry. The goal of optimization is to improve the performance of a given equipment or installation. CIRES, Lda has a VCM condensing unit which consists of two main stages, with a total of three Shell and Tube condensers, whose current outlet stream contains about 55%wt of VCM. This work aims to optimize the performance of the condensation unit, with a consequent recovery of higher amount of VCM.

From various proposals studied it was found out that the best alternative, in terms of performance and economic standpoint, is to replace the existing coolant of second stage of the condensation unit, refrigerated water (RW) at 8°C, with an aqueous solution of Ethylene Glycol (EG) operating at -30°C. From simulation study, this new operation with new coolant will allow to decrease the amount of VCM present in the inlet stream by 38%wt. This gain represents an estimated additional cost of 0,007€ per 1kg of extra condensed VCM.

Also, a new condenser has been designed to operate at -30°C, at shell side, whose heat transfer area calculated is 7m².

Índice

Índice de Figuras	xi
Índice de Tabelas	xv
Nomenclatura.....	xvii
Lista de abreviaturas	xix
Definições	xix
1 Introdução.....	1
1.1 Cloreto de vinilo.....	1
1.2 Poli(cloreto de vinilo)	2
1.3 Processos de polimerização.....	3
1.3.1 Polimerização em Suspensão	3
1.3.2 Polimerização em Emulsão	5
1.4 Aspectos de segurança de saúde e ambiental	7
2 Instalação de recuperação do VCM.....	9
2.1 Descrição geral do funcionamento da instalação.....	9
2.2 Unidade de condensação.....	11
2.2.1 Condensação	11
2.2.2 Condensadores do tipo Carcaça e feixe de Tubos	14
2.2.2.1 Carcaça.....	16
2.2.2.2 Tubos	16
2.2.2.3 Chicanas	18
2.2.2.4 Espelho de tubos.....	20
2.3 Dimensionamento dos permutadores de calor.....	20
2.3.1 Introdução e conceitos gerais.....	20
2.3.2 Procedimento de dimensionamento.....	22
2.3.3 Método de Colburn-Hougen.....	23
2.3.4 Factores de sujidade	25
3 Métodos de cálculo dos coeficientes individuais de transferência de calor	27
3.1 Padrões de escoamento do fluido do lado da carcaça.....	27
3.2 Coeficiente de transferência de calor dentro da carcaça (sem mudança de fase)	28
3.2.1 Método de Bell (1963)	28
3.2.1.1 Coeficiente de transferência de calor.....	28
3.2.1.2 Coeficiente de transferência de calor para fluxo cruzado ideal (<i>hoc</i>) ...	29
3.2.1.3 Factor de correcção da linha de tubos (<i>Fn</i>)	29
3.2.1.4 Factor de correcção da janela (<i>Fw</i>)	29
3.2.1.5 Factor correctivo para o <i>by-pass</i> (<i>Fb</i>).....	30

3.2.1.6	Factor de correcção para fugas (<i>FL</i>)	30
3.3	Coeficiente de transferência de calor nos tubos verticais (com mudança de fase)	30
3.3.1	Método de Nusselt	31
4	Apresentação e discussão dos resultados	33
4.1	Caracterização das condições de operação da unidade de condensação	34
4.2	Determinação da temperatura de condensação de VCG	35
4.3	Implementação da geometria dos condensares no <i>software</i> e o dimensionamento térmico dos mesmos	35
4.4	Simulação do processo de condensação	39
4.4.1	Estudos de sensibilidade do da unidade de condensação	40
4.4.1.1	Desempenho durante um ano de produção	40
4.4.1.2	Variação da área de transferência de calor do 2º estágio	42
4.4.1.3	Variação da área de transferência de calor do 1º estágio	43
4.4.1.4	Efeito de compressão da corrente VCG1	45
4.4.1.5	Alteração do fluido de refrigeração do 2º estágio	47
4.4.1.6	Combinação do aumento de pressão com a substituição do fluido de refrigeração no 2º estágio	48
4.4.1.7	Aplicação da condensação criogénica no 2º estágio	51
4.5	Dimensionamento do condensador para o 2º estágio	52
5	Conclusões	55
6	Bibliografia	57
7	Apêndices	61
A.	Método de Bell: cálculo do coeficiente de transferência de calor do lado da carcaça (sem mudança de fase)	63
B.	Método de Nusselt: cálculo do coeficiente de transferência de calor do lado de tubo (com mudança de fase)	70
C.	Descrição de simulação em <i>Aspen Plus</i>	72
D.	EOS Redlich-Kwong-Soave	77
E.	Folhas de especificações técnicas dos condensadores	79
F.	Tabelas com resultados dos estudos de sensibilidade	81
G.	Cálculo das potências de compressão e refrigeração	85
H.	Cálculo dos custos anuais de compressão, refrigeração e da unidade criogénica	89
I.	Dados auxiliares	93

Índice de Figuras

Figura 1.1. Representação do cloreto de vinilo: a) Estrutura molecular; b) Estrutura tridimensional ¹	1
Figura 1.2. Representação genérica da reacção de polimerização do VCM ⁶	3
Figura 1.3. Representação esquemática do processo de produção de PVC em Suspensão ^{1, 7}	4
Figura 1.4. Representação esquemática do processo de produção de PVC em emulsão ^{1, 7}	6
Figura 2.1. Esquema representativo da instalação industrial de recuperação do VCM	10
Figura 2.2. Perfil de temperaturas para condensação de composto puro ¹⁹	11
Figura 2.3. Esquema de condensação da mistura do vapor com gás não condensável ¹⁷	12
Figura 2.4. Perfil de temperaturas da condensação de mistura de vapor com não condensáveis (produzido em Aspen Plus [®])	13
Figura 2.5. Representação esquemática de um típico permutador de calor de Carcaça e feixe de Tubos ²⁰	14
Figura 2.6. Classificação dos permutadores de calor de Carcaça e feixe de Tubos de acordo com a TEMA ²¹	15
Figura 2.7. Representação de um tubo com alhetas (alhetas dispostas perpendicularmente ao tubo) ²¹	17
Figura 2.8. Padrões de disposição dos tubos dentro de um permutador de calor do tipo Carcaça e feixe de Tubos ²⁰	17
Figura 2.9. Tipos de chicanas mais utilizadas nos permutadores de calor do tipo Carcaça e feixe de Tubos ²¹	19
Figura 2.10. Representação esquemática do espelho de tubos dos condensadores de VCM (CIRES,Lda)	20
Figura 3.1. Escoamento ideal do fluido dentro da carcaça ^{16, 20}	27
Figura 3.2. Fugas e correntes by-pass na carcaça ^{16, 20}	27
Figura 4.1. Esquema de processo usado na simulação	33
Figura 4.2. Representação esquemática de um dos condensadores do 1º estágio e das respectivas correntes de entrada e saída.	36
Figura 4.3. Representação esquemática do condensador do 2º estágio e das respectivas correntes de entrada e saída.	36
Figura 4.4. <i>Layout</i> dos tubos no respectivo espelho de tubos	37
Figura 4.5. Efeito da temperatura de CW sobre o 1º estágio	40
Figura 4.6. Efeito da temperatura de CW sobre o 2º estágio	41

Figura 4.7. Efeito da variação da área do 2º estágio sobre a condensação no 2º estágio	43
Figura 4.8. Efeito do aumento da área do 1º estágio sobre a condensação no 1º estágio	44
Figura 4.9. Efeito do aumento da área do 1º estágio sobre a condensação no 2º estágio	45
Figura 4.10. Esquema da unidade de condensação com a instalação de compressão de VCG1	46
Figura 4.11. Efeito da compressão de VCG1 sobre a condensação no 2º estágio	47
Figura 4.12. Efeito da temperatura da solução de EG sobre a condensação no 2º estágio	48
Figura 4.13. Efeito da compressão de VCG1 e refrigeração sobre a condensação no 2º estágio	49
Figura 4.14. Potências de compressão/refrigeração <i>versus</i> %(m/m)VCM em VCG2	50
Figura 4.15. Custos anuais de operação compressão/refrigeração <i>versus</i> %(m/m)VCM em VCG2	51
Figura 7.1. Representação das zonas de escoamento espaços para fugas dentro da carcaça ^{16, 20}	65
Figura 7.2. Representação esquemática de áreas livres para fugas na carcaça do permutador de calor ^{16, 20}	66
Figura 7.3. Factor de transferência de calor para escoamento cruzado através do feixe de tubos ²⁰	66
Figura 7.4. Factor correctivo (F_n) ²⁰	66
Figura 7.5. Factor correctivo para a janela da chicana (F_w) ²⁰	67
Figura 7.6. Factor correctivo para a corrente <i>by-pass</i> (F_b) ²⁰	67
Figura 7.7. Factor correctivo (F_L) ²⁰	68
Figura 7.8. Factores geométricos da chicana ²⁰	68
Figura 7.9. Barra de equipamentos do Aspen Plus	72
Figura 7.10. Especificação dos componentes dos fluidos intervenientes no processo	72
Figura 7.11. Escolha do modelo termodinâmico da simulação	73
Figura 7.12. Especificação do permutador de calor	74
Figura 7.13. Parâmetros do permutador de calor	74
Figura 7.14. Hetran <i>Browser</i>	75
Figura 7.15. Especificação da geometria do equipamento	75
Figura 7.16. Especificação do método de cálculo dos coeficientes de transferência de calor	76

Figura 7.17. Representação das potências de compressão do <i>chiller</i> em função de temperatura	88
Figura 7.18. Factor de transferência de massa (<i>jd</i>) ¹⁶	94
Figura 7.19. Representação gráfica da temperatura de operação mínima em função da espessura de material ²⁸	94

Índice de Tabelas

Tabela 1.1. Propriedades físicas do VCM ^{1, 4}	1
Tabela 1.2. Exemplo da receita típica da polimerização de VCM em suspensão ^{1, 3, 7}	5
Tabela 1.3. Exemplo da receita típica da polimerização de VCM em emulsão ^{1, 10}	7
Tabela 1.4. Limites de emissão de VCM pela <i>ECVM</i> ¹⁴	8
Tabela 4.1. Composições das correntes e as condições de entrada de VCG na unidade de condensação	34
Tabela 4.2. Condições de operação dos fluidos de arrefecimento dos dois estágios de condensação	35
Tabela 4.3. Principais dimensões da carcaça dos condensadores de ambos os estágios	36
Tabela 4.4. Principais dimensões dos tubos dos condensadores de ambos os estágios	37
Tabela 4.5. Resultados do cálculo dos coeficientes de transferência de calor manual e computacional	39
Tabela 4.6. Resultados da simulação de condensação com CW a 18°C	40
Tabela 4.7. Comparação entre operação com etileno-glicol e unidade criogénica	52
Tabela 4.8. Parte da folha de especificação técnica do condensador dimensionado	53
Tabela 7.1. Propriedades da água (@28°C)	63
Tabela 7.2. Tamanhos <i>standart</i> das folgas entre carcaça e chicana	69
Tabela 7.3. Propriedades do vapor de VCM e do condensado	70
Tabela 7.4. Propriedades críticas do VCM, CM, CE, azoto e oxigénio ³⁰	78
Tabela 7.5. Folha de especificação técnica do condensador do 1º estágio	79
Tabela 7.6. Folha de especificação técnica do condensador do 2º estágio	80
Tabela 7.7. Desempenho da instalação de condensação ao longo do ano	81
Tabela 7.8. Efeito da variação da área de transferência de calor do 2º estágio sobre a condensação no 2º estágio	81
Tabela 7.9. Efeito da variação da área de transferência de calor do 1º estágio de condensação	82
Tabela 7.10. Efeito da compressão da corrente VCG1 sobre a condensação no 2º estágio	82
Tabela 7.11. Efeito da utilização da solução de etileno-glicol sobre a condensação no 2º estágio	83
Tabela 7.12. Resultados para o estudo do efeito da compressão de VCG1 e refrigeração no 2º estágio em simultâneo	83
Tabela 7.13. Resultados de dimensionamento do compressor	86

Tabela 7.14. Variáveis de dimensionamento do <i>chiller</i> e o respectivo resultado	87
Tabela 7.15. Proposta de <i>chillers</i>	88
Tabela 7.16. Potências dos compressores de <i>chillers</i> (calculadas)	88
Tabela 7.17. Dados para cálculo do tempo de operação anual	89
Tabela 7.18. Custos de operação anual de compressão e refrigeração	90
Tabela 7.19. Condições de entrada do azoto na unidade de condensação criogénica....	91
Tabela 7.20. Valores típicos dos factores de sujidade ²⁰	93
Tabela 7.21. Condutividade térmica de alguns metais ²⁰	93

Nomenclatura

Símbolo	Descrição	Unidades
$\%(m/m)$	Percentagem mássica	
$\%(v/v)$	Percentagem volúmica	
ΔH	Variação da entalpia da corrente	kJ/kg
ΔT	Diferença global de temperatura	$^{\circ}C$
ΔT_{ml}	Média logarítmica de temperaturas	$^{\circ}C$
μ	Viscosidade	Ns/m^2
A	Área de transferência de calor	m^2
CO	Custo de operação anual	$€/ano$
C_p	Capacidade calorífica	$kcal/(kg^{\circ}C)$
d	Diâmetro do tubo	mm
D	Difusividade	m^2/s
F	Caudal mássico total	kg/h
g	Aceleração gravítica	m/s^2
G'	Caudal por unidade de área	$kg/(m^2 s)$
G_s	Velocidade mássica da corrente	$kg/(m^2 s)$
h	Coeficiente de filme do fluido	$W/(m^2^{\circ}C)$
H	Entalpia da corrente	kJ/kg
h_d	Coeficiente de sujidade	$W/(m^2^{\circ}C)$
j_d	Factor de transferência de massa	
j_h	Factor de transferência de calor	
k	Condutividade térmica	$W/(m^{\circ}C)$
k_G	Coeficiente de transferência de massa	s/m
k_{ij}	Parâmetros de interacção binária de RK-Soave	
L	Comprimento dos tubos	mm
Nu	Número de Nusselt	
p	Pressão parcial do vapor	N/m^2
P	Pressão absoluta	bar
P_{ml}	Média logarítmica de pressões parciais	N/m^2
Q	Calor transferido por unidade de tempo	W
q	Fluxo de calor	W/m^2
Re	Número de Reynolds	
St 37.2	Aço inoxidável <i>Duplex</i>	
T	Temperatura de uma corrente	$^{\circ}C$
t	Tempo de operação anual	h/ano
U	Coeficiente global de transferência de calor	$W/(m^2^{\circ}C)$
W	Trabalho	kW

WN 1.4462	Aço de carbono	
η_m	Eficiência mecânica	%
η_s	Eficiência isentrópica	%
λ	Calor latente de condensação por unidade de massa	J/kg
ρ	Densidade	kg/m ³
ω	Factor acêntrico	
Γ	Caudal de condensado por unidade de perímetro do tubo	kg/(m s)
\bar{X}	Conversão média de VC	

Subscritos

1	Condição de entrada
2	Condição de saída
c	Propriedade do condensado
$comp$	Compressão
$crio$	Criogénica
f	Fluido frio
g	Propriedade do gás
i	Interior (<i>inner</i>)
o	Exterior (<i>outer</i>)
q	Fluido quente
$refrig$	Refrigeração
w	Propriedade da água

Lista de abreviaturas

CE	Cloreto de etilo
CM	Cloreto de metilo
CW	<i>Cooling water</i> (1º estágio)
EG	Etileno-glicol
PVC	Poli(cloreto de vinilo)
RCW	<i>Recovered cooling water</i> (1º estágio)
RRW	<i>Recovered refrigerated water</i> (2º estágio)
RVC	Cloreto de vinilo recuperado
RW	<i>Refrigerated water</i> (2º estágio)
VCG	Gás de cloreto de vinilo (entrada do 1º estágio)
VCG1	Gás de cloreto de vinilo (saída do 1º e entrada no 2º estágio)
VCG2	Gás de cloreto de vinilo (saída do 2º estágio)
VCL	Cloreto de vinilo líquido
VCM	Cloreto de vinilo (monómero)

Definições

$T_{CW}=25^{\circ}\text{C}$	Condição de operação máxima de verão da unidade de condensação
$T_{CW}=16^{\circ}\text{C}$	Condição de operação intermédia da unidade de condensação
$T_{CW}=10^{\circ}\text{C}$	Condição de operação de inverno da unidade de condensação

1 Introdução

1.1 Cloreto de vinilo

O cloreto de vinilo, com a designação I.U.P.A.C. de 2-cloroeteno (Figura 1.1), também conhecido por sigla VCM (*Vinyl Chloride Monomer*), usado como monómero, apresenta um ponto de ebulição de 259,7K (-13,8°C) e à temperatura e pressão normal ($1,01325 \times 10^5 \text{ Pa}$ e 273,15K) apresenta-se como um gás.¹⁻⁵



Figura 1.1. Representação do cloreto de vinilo: a) Estrutura molecular; b) Estrutura tridimensional¹

Na fase gasosa o VCM é totalmente incolor apresentando um cheiro ligeiramente adocicado, é solúvel em hidrocarbonetos alifáticos e aromáticos, ésteres, álcoois e na grande maioria dos solventes orgânicos.^{1-3, 5} A Tabela 1.1 apresenta as propriedades físicas deste composto químico.

Tabela 1.1. Propriedades físicas do VCM^{1, 4}

Propriedade	Unidade	Valor
Massa Molecular	g.mol^{-1}	62,5
Temperatura de Ebulição (101325Pa)	K	259,25
Temperatura de Fusão (101325Pa)	K	119,36
Temperatura Crítica	K	432
Pressão Crítica	MPa	5,67
Volume Crítico	$\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}$	179
Factor Acêntrico		0,100
Entalpia de Fusão (119,36K)	kJ.mol^{-1}	4,744
Entalpia de Vaporização (298,15K)	kJ.mol^{-1}	20,11
Entalpia de Formação (298,15K)	kJ.mol^{-1}	28,45
Viscosidade (líquido)		
233,15K	mPa.s^{-1}	0,345
253,15K		0,272
263,15K		0,244
Limites de Explosividade no ar		
- limite superior	% Vol	33
- limite inferior		3,6
Temperatura de auto ignição	K	745

O VCM, na forma industrial, é relativamente estável e apresenta baixa reactividade. No entanto, a contaminação com o oxigénio pode levar à formação de poli(peróxidos de cloreto de vinilo) que se decompõem e levam à polimerização do VCM. Em virtude deste facto, os produtores do VCM tomam medidas para evitar a contaminação com o oxigénio e, simultaneamente, adicionam pequenas quantidades de inibidor (2-10 ppm), usualmente fenol ou derivados de fenol, que previnem a peroxidação do monómero e inibem a reacção, sobretudo em condições de armazenamento de longa duração.³

No caso da CIRES,Lda, o VCM é adquirido em localizações internacionais e é transportado via marítima até ao porto de Aveiro onde é descarregado e armazenado em tanques esféricos. O VCM recebido no porto de Aveiro é transferido até a fábrica localizada em Estarreja por um *pipeline*. No entanto, podem ser usados outros meios de transporte, tais como a rodovia ou a ferrovia.

A pressão de vapor do VCM, na gama das temperaturas de polimerização (323,15K, 343,15K), é de 800-1250kPa. O VCM é ligeiramente solúvel em água (0.11 wt% @ 20°C), sendo este facto importante para os processos de polimerização.¹⁻⁵

1.2 Poli(cloreto de vinilo)

A reacção mais importante do VCM é a sua polimerização ou co-polimerização de adição na presença de uma substância capaz de formar radicais livres, normalmente denominada por iniciador. A polimerização do VCM é um processo extremamente exotérmico, comparativamente com outros monómeros, apresentando uma entalpia de polimerização de 1540 kJ.mol⁻¹. Por esta razão, com o fim de remover o calor produzido na reacção e, por conseguinte, controlar a temperatura do meio reaccional, os reactores de polimerização do VCM possuem camisa de transferência de calor, condensador de refluxo (onde o monómero é condensado e volta para o reactor no estado líquido) e chicanas. As chicanas servem também para assegurar boa agitação da mistura reaccional.^{1, 2, 4}

Poli(cloreto de vinilo), vulgo PVC, é o produto de polimerização do VCM. O PVC representa o segundo polímero mais consumido a nível mundial.⁶ Comercialmente, o PVC é produzido por polimerização radicalar livre do VCM. A reacção genérica de produção do PVC está representada na Figura 1.2. No polímero comercial, n varia entre 625 e 2700.⁶

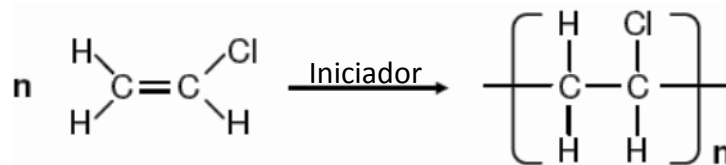


Figura 1.2. Representação genérica da reacção de polimerização do VCM⁶

Com o fim de tornar seu processamento e aplicação possíveis, o PVC é sempre misturado com estabilizadores térmicos, lubrificantes, plastificantes, cargas (*fillers*) e outros aditivos. Todos estes aditivos influenciam suas propriedades físicas e mecânicas finais.^{2, 3}

A título de exemplo, quando ao PVC são adicionados plastificantes, este comporta-se como material bastante flexível, semelhante à borracha natural. Desta forma, o PVC flexível (plastificado) é usado numa grande variedade de aplicações, tais como: indústria de peças de interior de automóvel, revestimento de cabos eléctricos, vestuário impermeável e vedantes.³

Os desenvolvimentos nas técnicas de processamento e aditivação têm um papel fundamental para a utilização do PVC na construção civil, nomeadamente no revestimento externo de madeira e fabrico de janelas.^{3, 7}

Para além das aplicações supramencionadas, o PVC também é utilizado no fabrico das mangueiras de jardim, cortinas de chuveiro, tapetes, brinquedos, garrafas, espumas e telas de revestimento.^{3, 7}

1.3 Processos de polimerização

1.3.1 Polimerização em Suspensão

O traçado típico de uma instalação de polimerização de PVC em suspensão é apresentado na Figura 1.3

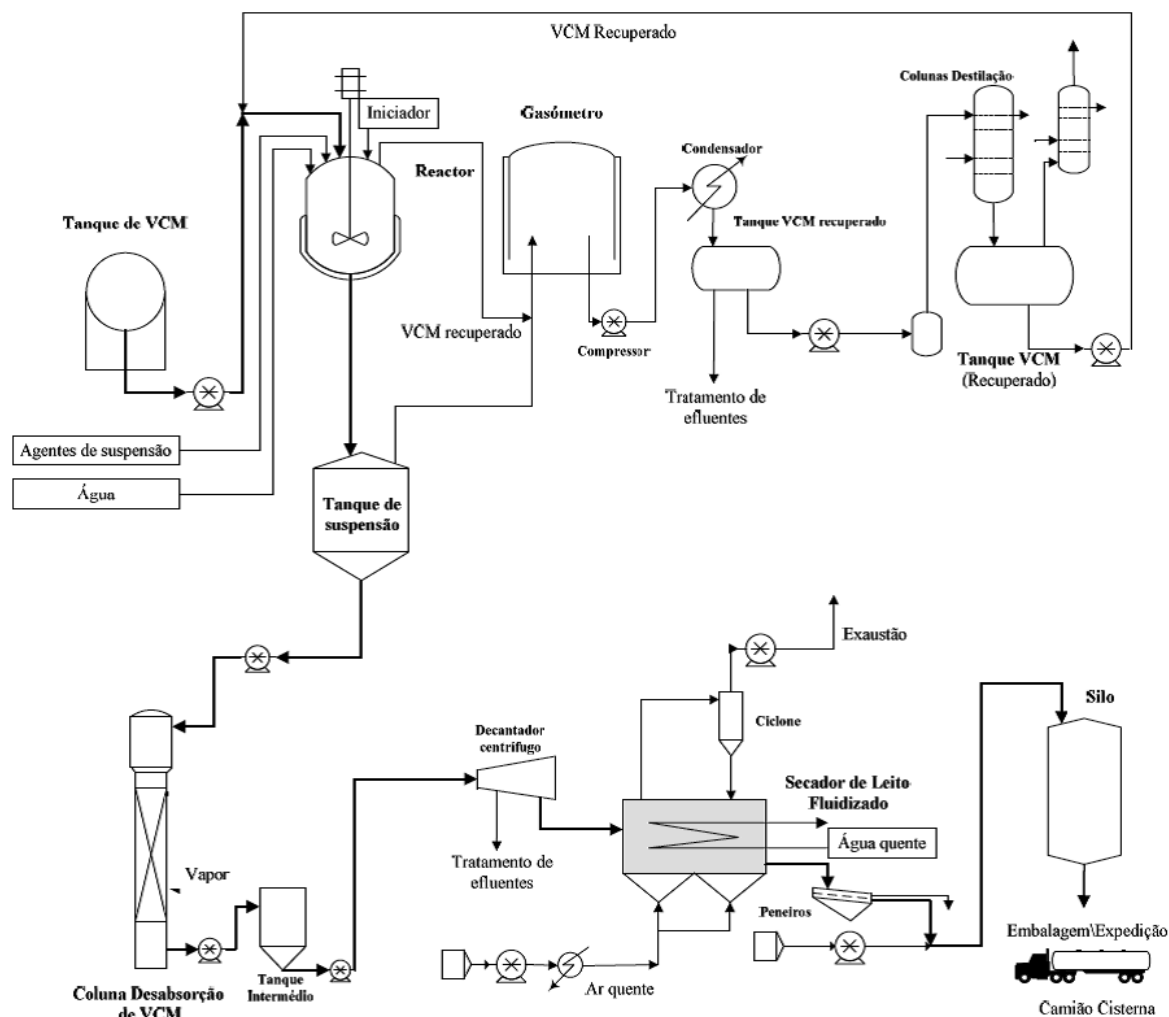


Figura 1.3. Representação esquemática do processo de produção de PVC em Suspensão^{1, 7}

Este processo de polimerização usa a água desionizada como a fase contínua do sistema reaccional. O processo de polimerização em suspensão ocorre dentro das gotículas do monómero dispersas em água com o diâmetro médio de 30-150 μm . Esta dispersão é estabilizada com os agentes de suspensão para controlar a coalescência das mesmas. É usado um iniciador solúvel no monómero, que dá origem aos radicais livres.^{2, 3, 5, 8, 9}

Antes de carregar os reagentes dentro do reator é necessário remover o oxigénio atmosférico que se encontra dentro do equipamento, ou criar a atmosfera inerte dentro do reator com, por exemplo, azoto (N_2). De seguida, a água e outros ingredientes de polimerização, tais como iniciadores e agentes de suspensão, são adicionados ao reator.

A formulação que é carregada no reactor é, normalmente, chamada de receita. A receita típica de uma polimerização em suspensão é dada na Tabela 1.2.

Tabela 1.2. Exemplo da receita típica da polimerização de VCM em suspensão^{1, 3, 7}

Item	%(m/m) (relativamente ao VCM)
VCM	100%
Água (desionizada)	100-120%
Agentes de Suspensão	0,05-0,10%
Iniciadores	0,03-0,16%
Temperatura de reacção	45-75°C
Conversão final (PVC/VCM)	85-95%

Depois de os componentes da receita estarem carregados, o conteúdo do reactor é aquecido até a temperatura de reacção. A reacção de polimerização ocorre nas condições isotérmicas e a pressão dentro do reactor mantém-se constante até que cerca de 80%³ de VCM, dependendo da qualidade do polímero em produção, se converte em PVC. A pressão total do sistema começa a diminuir, devendo-se este facto ao consumo do monómero e consequente aumento da quantidade de PVC formado. Esta queda de pressão assinala o fim da reacção de polimerização. Segue-se, então, a etapa de recuperação, durante a qual é removido do reactor o VCM não reagido e é enviado para a unidade de recuperação. Depois de remover o VCM, a suspensão ainda pode conter 2-3%(m/m) do monómero não reagido. Este VCM é removido continuamente como gás numa coluna de desabsorção (*stripping*) e, posteriormente, é recuperado e liquefeito na unidade de recuperação de VCM.^{2, 3, 8, 9}

O VCM recuperado pode ser reutilizado nos ciclos produtivos posteriores.

Quanto à suspensão de PVC, esta é alimentada a um decantador centrífugo de onde sai um bolo (*wet-cake*) contendo 20-30%(m/m) de humidade. A restante água do bolo é removida numa secagem de leito fluidizado, obtendo-se o pó de PVC.^{2, 3, 8, 9}

1.3.2 Polimerização em Emulsão

O traçado da típica instalação de polimerização de PVC em emulsão é apresentado na Figura 1.4.

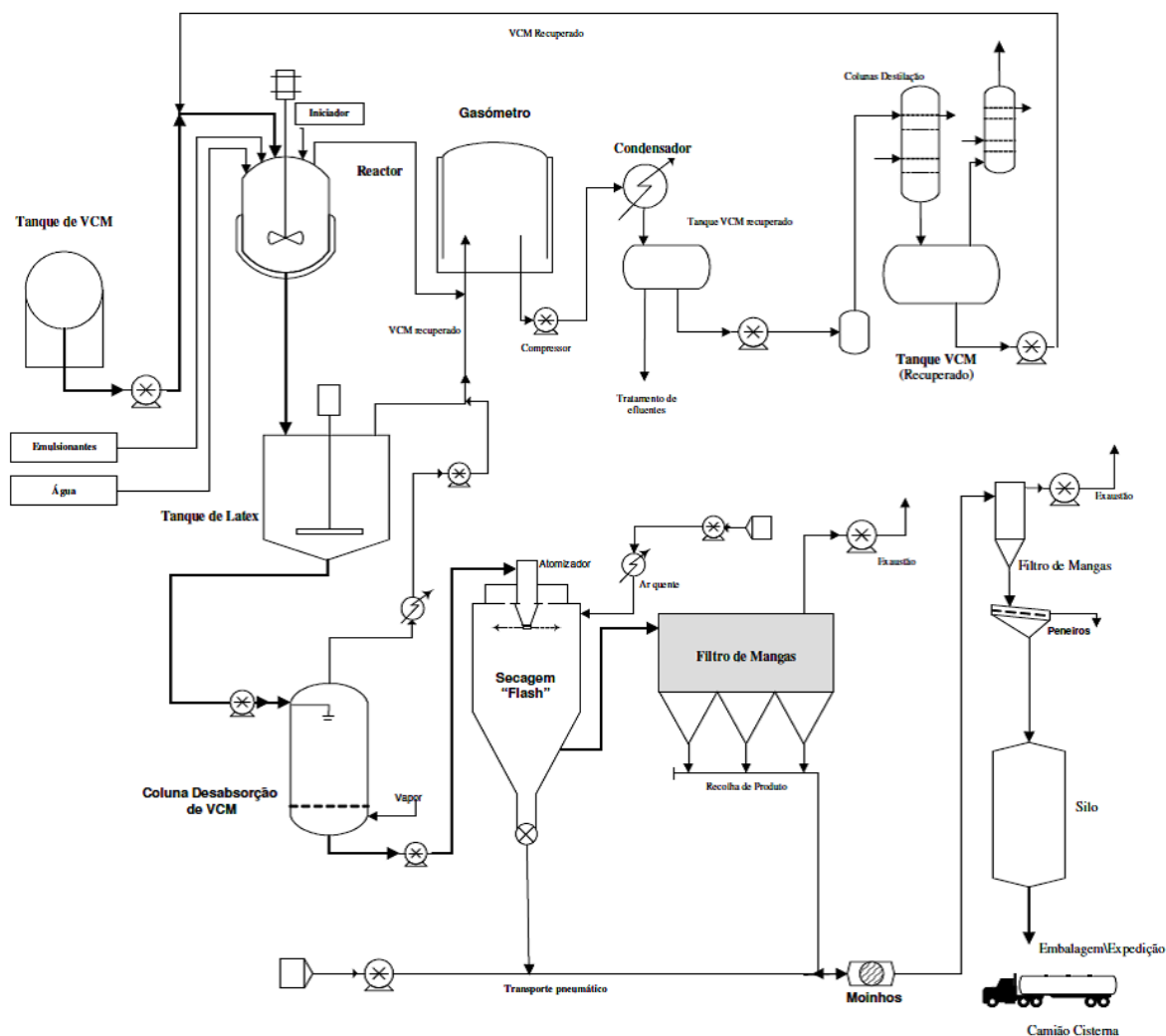


Figura 1.4. Representação esquemática do processo de produção de PVC em emulsão^{1,7}

Tal como na polimerização em suspensão, a água desionizada é usada como meio dispersante. No entanto, são usados tensioactivos, normalmente iónicos, e iniciadores solúveis em água. No final de reacção é obtida uma dispersão coloidal de partículas de PVC em água com um diâmetro que varia entre 0.1 e 3µm, vulgarmente designada por látex. O PVC de emulsão passa pela secagem em *spray* e, posteriormente, pelo moinho mecânico para desintegração de aglomerados, obtendo-se um pó fino. O produto final é normalmente misturado com plastificantes, dando origem a uma dispersão (suspensão) geralmente designada por Pasta ou Plastisol. Visto que o PVC em emulsão apresenta uma menor expressão no mercado de PVC, as instalações industriais são normalmente de pequena dimensão, com reactores com capacidades na ordem dos 20-50 m³.^{2, 8, 10, 11}

Na Tabela 1.3 encontra-se um exemplo da receita típica do processo de polimerização de VCM em emulsão.

Tabela 1.3. Exemplo da receita típica da polimerização de VCM em emulsão^{1, 10}

Item	%(m/m) (relativamente ao VCM)
VCM	100%
Água (desionizada)	110-140%
Emulsionante(s)	0,1-1,0%
Iniciadores	0,1-0,2%
Temperatura de reacção	40-60°C
Conversão final (PVC/VCM)	85-95%

Tal como acontece no caso da polimerização em suspensão, o tipo e a concentração do tensioactivo usado na emulsão desempenha um papel importante na estabilização das partículas do polímero, assim como nas propriedades conferidas ao produto final. A particularidade de utilização da polimerização em emulsão é a utilização de baixas velocidades de agitação de modo a manter a estabilidade de látex.

Em consequência disso, a remoção de calor da mistura reaccional é altamente penalizada, pois os coeficientes globais de transferência de calor passam a ser mais reduzidos.^{8, 10}

1.4 Aspectos de segurança de saúde e ambiental

Antes de 1960, o principal problema de saúde ocupacional nas instalações com VCM prendia-se com o seu elevado efeito anestésico em concentrações superior a 2000 ppm (v/v). Também, o elevado risco de inflamabilidade e explosão do VCM, obrigava a uma minimização e contenção de fugas, sobretudo nos equipamentos sob pressão. No entanto, desde meados de 1970, o cloreto de vinilo foi considerado um agente carcinogénico de elevado potencial. Este novo dado obrigou a mudanças drásticas na tecnologia no sentido da protecção dos trabalhadores.^{3, 4} Actualmente, nos E.U.A., o limite máximo imposto legalmente é uma média de 1 ppm durante um período de 8 horas, ou um máximo de 5 ppm durante 15 minutos.¹⁰ De forma análoga, na União Europeia, a média anual de VCM no ambiente industrial deverá ser inferior a 3 ppm.¹² Os empregados são obrigados a monitorizar a atmosfera industrial e reportar sistematicamente os resultados às autoridades estatais.¹³

Também, na indústria do PVC, tem-se assistido a um esforço contínuo na redução progressiva de emissões de monómero, quer por tratamento final de correntes líquidas e gasosas, quer por diminuição da quantidade de VCM residual no produto final. Como

referência, a *European Council of Vinyl Manufacturers (ECVM)*, no seu compromisso voluntário de redução do impacto ambiental, estabeleceu metas de emissões máximas de monómero residual nos efluentes e polímero, assim como rácios globais por tonelada de PVC produzido, mediante instalação das melhores tecnologias disponíveis.¹⁴

Na Tabela 1.4 estão esquematizados os limites de emissão de VCM no polímero e efluentes industriais publicados pela *ECVM*.

Tabela 1.4. Limites de emissão de VCM pela *ECVM*¹⁴

Tipo de emissão	Quantidade permitida
Emissão total de VCM na produção de PVC	< 100 g.ton ⁻¹ de S-PVC < 1000 g.ton ⁻¹ de E-PVC
Concentração de VCM nos efluentes líquidos (S-PVC e E-PVC)	< 1 g.m ⁻³ de efluente
Concentração de VCM nos efluentes gasosos	< 5 mg.Nm ⁻³ de efluente
Concentração de VCM no Produto final	< 5 g.ton ⁻¹ de S-PVC (utilizações gerais) < 1 g.ton ⁻¹ de E-PVC e S-PVC (utilizações médicas/alimentares)

A CIRES,Lda possui uma instalação de tratamento dos efluentes dos processos de polimerização de VCM. Estas correntes são submetidas aos rigorosos processos de tratamento e recuperação de VCM, cumprindo a legislação e metas de emissões estabelecidas.

O processo de recuperação de VCM mais comum nas indústrias é a condensação. A optimização do funcionamento desta unidade possibilitará recuperar maior quantidade de VCM que não reage durante a produção de PVC e reentroduzi-lo nos ciclos de produção posteriores. Por sua vez, maior condensação de VCM implicará uma optimização dos custos de operação dos processos de recuperação existentes.

2 Instalação de recuperação do VCM

2.1 Descrição geral do funcionamento da instalação

A Figura 2.1 apresenta um esquema representativo da instalação de condensação e recuperação do VCM.

Todo o VCM que não reagiu, proveniente das reacções de polimerização, é direccionado para o gasómetro principal. Gasómetro é um tanque grande cujo objectivo é armazenar um gás à temperatura ambiente e pressão atmosférica. Em geral, os gasómetros encontram-se cheios de água tendo uma tampa, em forma de campânula móvel, debaixo da qual o gás é armazenado. O conteúdo do gasómetro consiste, maioritariamente, de VCM, cerca de 98%(m/m) e outros compostos, dos quais se destacam cloreto de metilo (CH_3Cl), cloreto de etilo ($\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{Cl}$), azoto (N_2) e oxigénio (O_2), sendo os últimos dois em muito pouca quantidade ($\approx 1,3\%$ (m/m)). A presença de N_2 e O_2 é muito importante pois exercem forte influência sobre o processo de recuperação do VCM, processo este que consiste em operações de condensação (ver Figura 2.1).

A corrente gasosa que sai do gasómetro principal, denominada por VCG (VC gás), passa por uma unidade de compressão, antes de entrar na unidade de condensação, da qual sai a 7bar. Assim, a corrente VCG pode ser tratada com o fluido de arrefecimento a temperaturas mais altas.

A unidade de condensação é composta por 2 estágios. Ambos os estágios usam água como o fluido de arrefecimento. No entanto, no primeiro estágio utiliza-se água de arrefecimento (CW) com a temperatura variável máxima até 25°C, aproximadamente, enquanto no segundo estágio usa-se água refrigerada (RW) com a temperatura constante de 8°C. A corrente de VCG que não condensou no primeiro estágio, e que, por conseguinte, segue para o segundo estágio, denomina-se por VCG1. Da mesma maneira, o VCG que não condensa neste unidade denomina-se por VCG2 (ver Figura 4.2 e Figura 4.3). O VCG2 segue para o gasómetro secundário, de onde sai para o tratamento na unidade criogénica.

A produção anual de PVC na CIRES,Lda é de 200000ton. Uma vez que a conversão média de VCM em PVC é de 80%³, a quantidade de VCM que é preciso recuperar anualmente é de 50000ton (ver Apêndice H, alínea a).

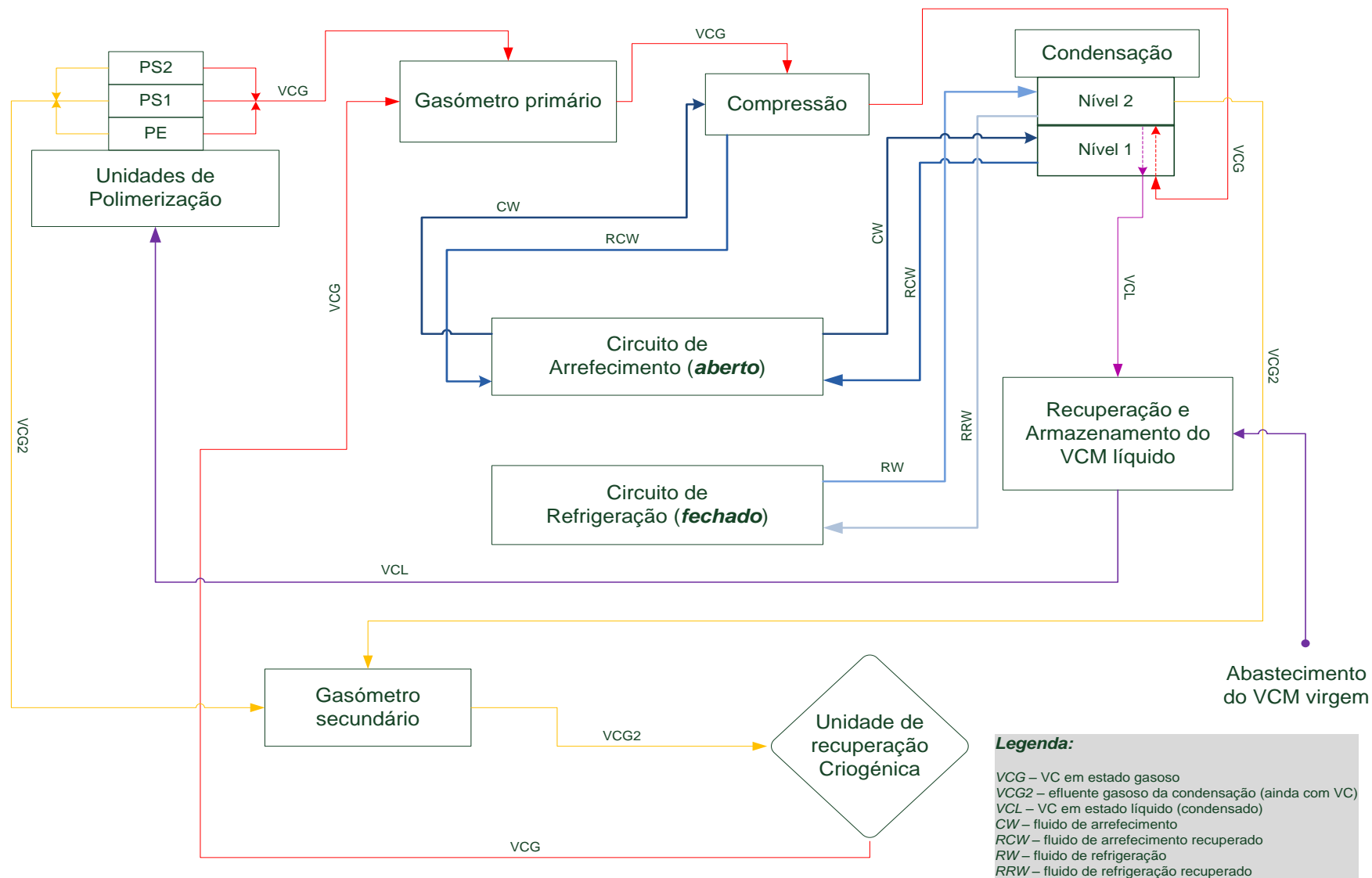


Figura 2.1. Esquema representativo da instalação industrial de recuperação do VCM

Actualmente, nas condições de operação de verão ($T_{CW} = 25^{\circ}\text{C}$), a corrente de saída da unidade de condensação (VCG2) contém cerca de 55%(m/m) de VCM na sua composição (ver Tabela 4.1). O objectivo do presente trabalho é reduzir a quantidade de VCM nesta corrente para cerca de 20%(m/m), para as mesmas condições de operação.

Todo o VCM condensado (VCL) é recolhido e armazenado na fase líquida no tanque do VCM recuperado. Este VCM passa a ser designado de RVC (VC recuperado). O RVC pode ser reintroduzido no processo de polimerização e utilizado normalmente.

2.2 Unidade de condensação

Este trabalho centra-se no estudo da unidade de condensação, seu desempenho actual e formas de o otimizar, sempre com o objectivo de diminuir a quantidade do monómero na corrente VCG2.

Por esta razão, as secções seguintes descrevem resumidamente o que é a condensação, o tipo de condensadores utilizados, sua construção, funcionamento e método de dimensionamento desse equipamento industrial.

2.2.1 Condensação

Os compostos químicos podem existir nos três estados físicos, gás, sólido e líquido. A mudança de gás para líquido chama-se condensação. A condensação ocorre em grande variedade de aplicações de engenharia. O tipo de condensação mais comum ocorre quando uma superfície fria, com a temperatura inferior á temperatura local de saturação do vapor ou mistura de vapor/gás, é colocada em contacto com o vapor a condensar. A condensação de um composto puro, a uma pressão constante, ocorre isotermicamente (ver Figura 2.2), na qual existe permuta de calor com a corrente de arrefecimento.¹⁵⁻¹⁹

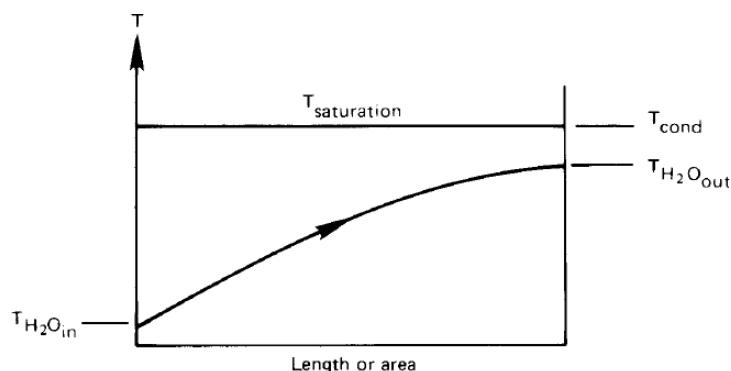


Figura 2.2. Perfil de temperaturas para condensação de composto puro¹⁹

A condensação pode ocorrer via dois mecanismos físicos diferentes que dependem da capacidade do condensado revestir ou não a superfície fria. Quando o condensado molha a superfície, sobre a qual condensa, forma-se um filme contínuo de condensado. Este tipo de condensação é chamado de *condensação em filme*. Por outro lado, quando o condensado não reveste a superfície fria, formam-se gotas de condensado. Este processo é conhecido como *condensação por gotas*.¹⁵⁻¹⁹

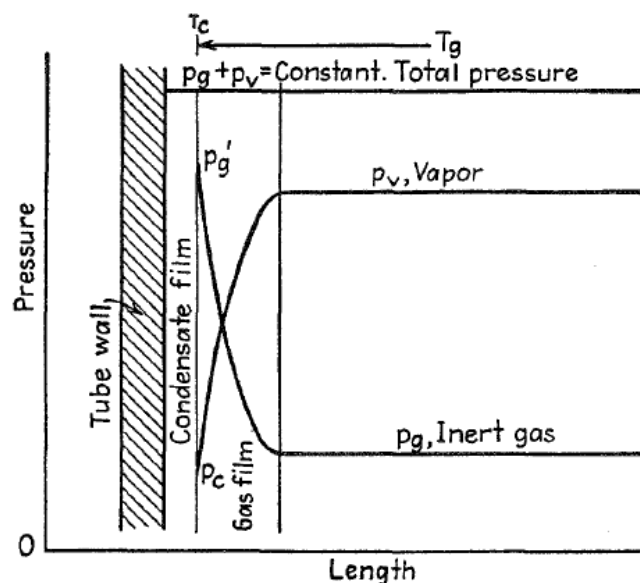


Figura 2.3. Esquema de condensação da mistura do vapor com gás não condensável¹⁷

Quando uma mistura de vapor e gás não condensável é alimentada a um condensador em que os tubos se encontram a temperatura inferior à de condensação, o filme de condensado é formado à superfície do tubo. Por sua vez, forma-se também o filme de gás por cima do filme de condensado (ver Figura 2.3). Neste caso, a transferência de calor do vapor para a superfície fria ocorre via dois mecanismos. Primeiro, o calor sensível passa do vapor para a superfície devido à diferença de temperaturas. Segundo, uma vez que a concentração de vapor na corrente principal é superior do que na camada do gás não condensável, que se forma por cima do filme de condensado, as moléculas de vapor difundem através da camada do gás para a superfície do filme de condensado e condensam libertando o seu calor latente. Desta forma, a real taxa de condensação determina-se combinando estes dois efeitos e o seu cálculo requer o conhecimento da transferência de massa por difusão (ver secção 2.3.3 para o método de cálculo a aplicar).¹⁵⁻¹⁸

A presença da camada do gás não condensável é uma resistência adicional ao processo de transferência de calor e, por isso, faz diminuir o coeficiente global de transferência de calor do processo.¹⁵⁻¹⁸

Deste modo, a condensação de uma mistura de gases impõe algumas dificuldades. Quando se trata de uma mistura de gases, a condensação desta mistura, a uma dada pressão, não ocorre isotermicamente mas sim, ao longo de um intervalo de temperaturas, pelo que o valor do coeficiente de transferência de calor não é constante (ver Figura 2.4, linha vermelha). Em alguns casos varia muito com a variação da composição da mistura.

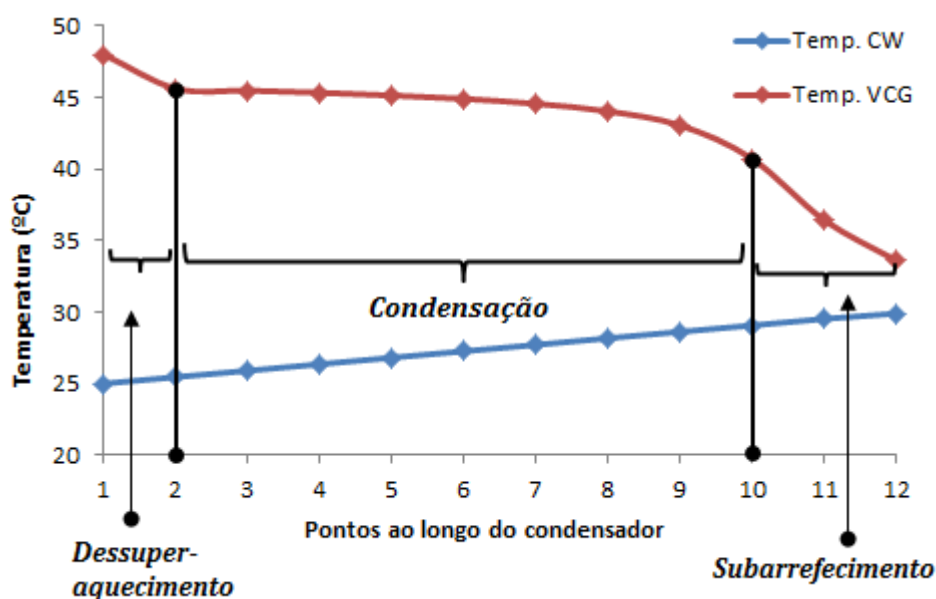


Figura 2.4. Perfil de temperaturas da condensação de mistura de vapor com não condensáveis (produzido em Aspen Plus®)

No perfil de temperatura de uma mistura de gases que condensa num permutador de calor pode-se distinguir 3 fases diferentes: dessuperarrefecimento, condensação (não isotérmica) e subarrefecimento.

O dessuperarrefecimento da corrente ocorre quando esta entra no condensador sobreaquecida. Nestes casos, a corrente, antes de começar a condensar, arrefece até atingir a temperatura de saturação.

De seguida ocorre a condensação não isotérmica da corrente gasosa. Na Figura 2.4 a fase de condensação é claramente não isotérmica. A variação da temperatura de condensação faz variar o coeficiente de transferência de calor do processo.

2.2.2 Condensadores do tipo Carcaça e feixe de Tubos

Os permutadores de calor do tipo Carcaça e feixe de Tubos são o equipamento de transferência de calor mais usado, apresentando várias vantagens^{15, 16, 20}, tais como:

1. Grande área de transferência de calor no pequeno volume.
2. Boa construção mecânica para operações sob pressão.
3. Técnicas de fabrico e construção bem estabelecidas.
4. Pode ser construído de grande variedade de materiais.
5. Limpeza fácil.
6. Procedimentos de dimensionamento bem estabelecidos.

A construção destes permutadores permite operar com eles numa grande gama de condições de pressão e temperatura, nomeadamente para fins de vaporização e condensação.^{15, 16, 20}

A Figura 2.5 mostra a configuração mais comum dos permutadores de calor do tipo Carcaça e feixe de Tubos.

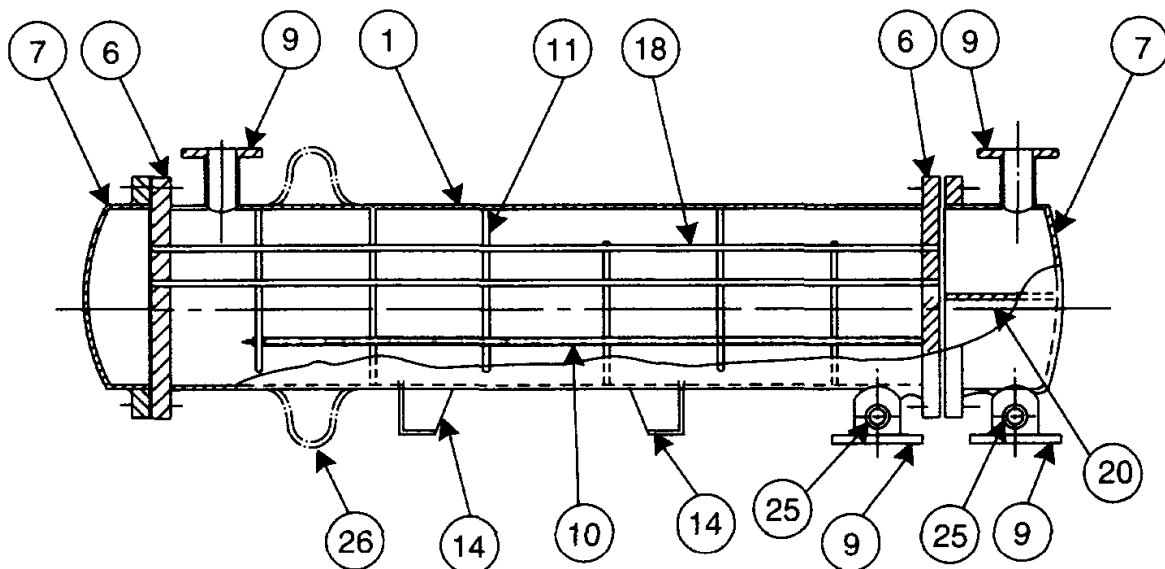


Figura 2.5. Representação esquemática de um típico permutador de calor de Carcaça e feixe de Tubos²⁰

As partes constituintes do permutador de calor, identificadas na Figura 2.5 com os números são:

- | | |
|----------------------------|----------------------------------|
| 1. Carcaça | 7. Cabeça/Cauda |
| 6. Espelho de tubos (fixo) | 9. Tubuladura de entrada e saída |

10. Tirante e espaçador

11. Chicana

14. Suporte

18. Tubos

25. Conexões de teste

26. Juntas de expansão

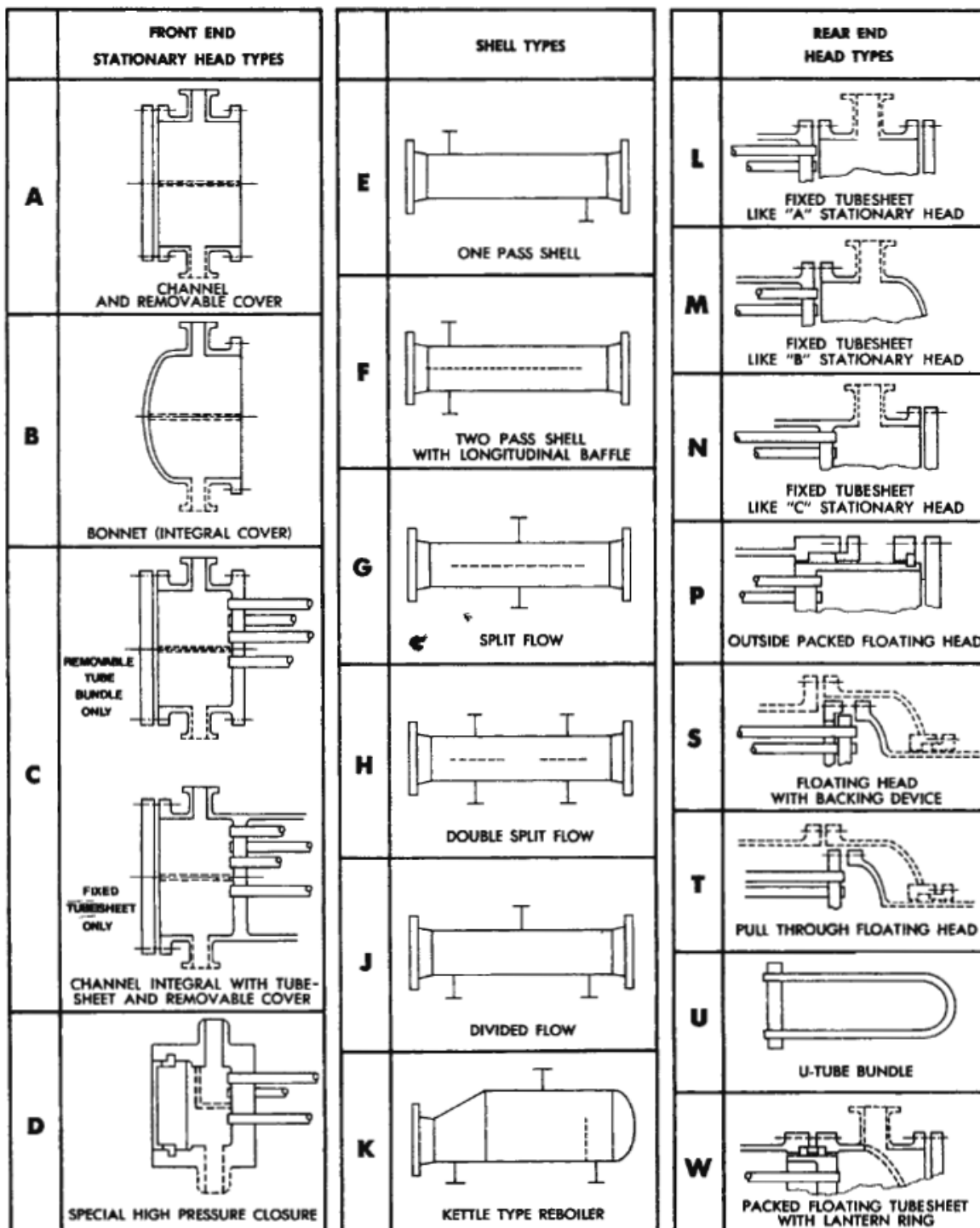


Figura 2.6. Classificação dos permutadores de calor de Carcaça e feixe de Tubos de acordo com a TEMA²¹

Os permutadores de calor do tipo Carcaça e feixe de Tubos são construídos de acordo com os padrões mecânicos e detalhes de desenho desenvolvidos pela *Tubular Exchanger Manufacturers Association* (TEMA). Estes padrões não designam nem recomendam o método de dimensionamento térmico que tem que ser utilizado na aplicação de um processo específico. Estes aspectos ficam ao critério do engenheiro de projecto porque muitos detalhes que são únicos aos permutadores de calor dependem da aplicação que se dá ao equipamento. No entanto, a TEMA traça fundamentos básicos da transferência de calor e sugere factores de sujidade para grande variedade de fluidos ou aplicações processuais.^{16, 20, 21} A Figura 2.6 apresenta as classificações de várias configurações dos permutadores de calor de acordo com a TEMA.

De acordo com TEMA há 3 classes de padrões mecânicos: *R*, *C* e *B*, que representam a severidade processual a que o equipamento pode ser submetido. A classe *R* designa permutadores com requerimentos severos da indústria petrolífera e outras aplicações processuais relacionadas. A classe *C* designa permutadores com requerimentos geralmente moderados dos processos comerciais. Por último, a classe *B* diz respeito aos requerimentos de desenho e fabricação dos permutadores para a aplicação nos processos químicos.²¹

De seguida são descritos os constituintes mais importantes dos permutadores de calor de Carcaça e feixe de Tubos. Estes constituintes dizem-se mais importantes porque exercem forte influência sobre o padrão de escoamento dos fluidos dentro do permutador, afectando positiva ou negativamente o coeficiente de transferência de calor.

2.2.2.1 Carcaça

A carcaça é o elemento cilíndrico que envolve os tubos e contém o fluido que escoar por fora dos tubos. O tipo da carcaça do permutador de calor tem que ser estabelecida antes de se fazer qualquer avaliação de desempenho do equipamento. A geometria da carcaça está relacionada com o espelho de tubos e as chicanas. As cabeças do permutador podem ser soldadas ou aparafusadas à carcaça. Vários tipos de carcaças encontram-se identificados na Figura 2.6.^{15, 21}

2.2.2.2 Tubos

Os tubos são componentes básicos que fornecem a área de transferência de calor entre os fluidos que escoam do lado da carcaça e do lado dos tubos. Os tubos são mantidos no

sítio pelo espelho de tubos em cada ponta do permutador, excepto no desenho do tipo U .¹⁵

2.2.2.2.1 Tipos de tubos

Dois tipos de tubos usados nos permutadores de calor do tipo Carcaça e feixe de Tubos são os tubos planos e os tubos com alhetas (externas ou internas) chamados *finned tubes*.

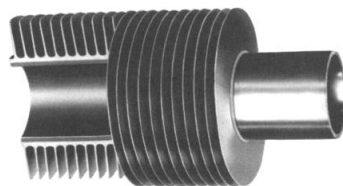


Figura 2.7. Representação de um tubo com alhetas (alhetas dispostas perpendicularmente ao tubo)²¹

Existe grande variedade de materiais disponíveis para a construção dos tubos planos. Entre estes materiais destacam-se o aço de carbono, aço inoxidável e níquel. No entanto, a escolha do material do tubo tem de ser coordenada com a sua inserção e soldagem no espelho de tubos. Outro factor que influencia a escolha do material dos tubos é a corrosão admitida, que se deve ao fluido que escoar dentro dos tubos. Os *finned tubes* são utilizados tipicamente nos processos de transferência de calor que envolvem gases a escoar fora dos tubos. A razão disso é que as alhetas nas paredes dos tubos aumentam a área de transferência de calor disponível.^{15, 21}

2.2.2.2.2 Arranjos de tubos

Dentro do permutador de calor os tubos podem ser dispostos em seguintes padrões: a) triângulo equilátero, b) quadrado ou c) quadrado rodado (ver Figura 2.8).

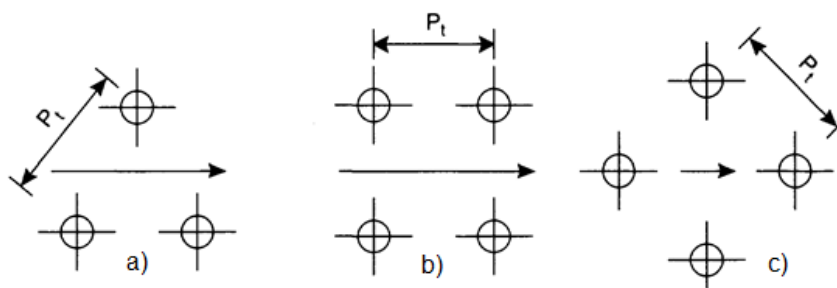


Figura 2.8. Padrões de disposição dos tubos dentro de um permutador de calor do tipo Carcaça e feixe de Tubos²⁰

A seta presente na figura assinala o sentido de escoamento do fluido do lado da carcaça através do feixe de tubos.

Os padrões triangulares e quadrados rodados asseguram maior transferência de calor, mas às custas de maior perda de carga, em comparação com o padrão quadrado normal. O padrão quadrado normal e o rodado são usados para os fluidos muito sujos, onde é necessário limpar mecanicamente o exterior dos tubos. O *pitch* recomendado (distância entre os centros dos tubos, identificado na Figura 2.8 por P_t) é de 1,25 vezes o diâmetro exterior do tubo.²⁰

2.2.2.3 Chicanas

As chicanas servem dois objectivos: primeiro, e o mais importante, chicanas suportam tubos contra flexão e vibração, e segundo, elas guiam o fluido dentro da carcaça através do campo dos tubos, melhorando, assim, a intensidade de transferência de calor. A consequência disso é o aumento da perda de carga dentro da carcaça. Existem dois grandes grupos de chicanas: chicanas do lado dos tubos e chicanas do lado da carcaça.^{15, 21}

2.2.2.3.1 Chicanas do lado dos tubos

As chicanas do lado dos tubos são inseridas na cabeça de frente e de trás do permutador de calor. Podem ser soldadas ou fundidas. Desta forma, estas chicanas direccionam o escoamento do fluido através dos tubos na direcção pretendida, assegurando boa transferência de calor.²¹ Dito de forma simples, as chicanas do lado dos tubos determinam quantas passagens nos tubos terá o permutador de calor.²¹

2.2.2.3.2 Chicanas do lado da carcaça

O desempenho do lado da carcaça do permutador depende da eficácia com que o fluido da carcaça contacta com os tubos. Esta eficácia é o resultado directo da geometria das chicanas utilizadas. O corte da chicana determina a velocidade do fluido entre a chicana e a parede da carcaça, e o espaçamento entre as chicanas determina as velocidades paralelas e cruzadas do fluido que afecta a transferência de calor e a perda de carga.²¹

Existe grande variedade das chicanas para o lado da carcaça. As chicanas mais utilizadas na indústria são: a) chicanas segmentadas, b) chicanas em forma de disco e *doughnut* e c) *rod baffles*. Na Figura 2.9 estão representados os três tipos das chicanas mencionadas acima.

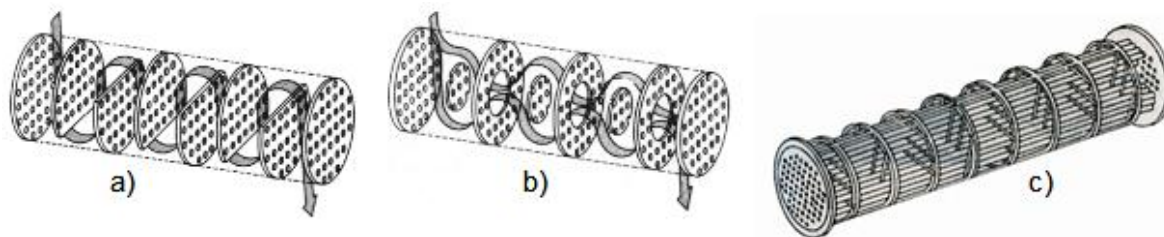


Figura 2.9. Tipos de chicanas mais utilizadas nos permutadores de calor do tipo Carcaça e feixe de Tubos²¹

2.2.2.3.2.1 Chicanas segmentadas

Este tipo de chicana, provavelmente, é o mais utilizado. A Figura 2.9a) representa a chicana segmentada com corte horizontal. Estas chicanas são, no fundo, círculos com diâmetro pouco inferior ao diâmetro da carcaça, do qual foi cortada a porção horizontal ou vertical. O corte da chicana, que representa a área livre para o escoamento do fluido da carcaça, equivale, usualmente, a 20-45% da área total da chicana. As chicanas com o corte horizontal são usadas nos permutadores de calor verticais e em vice-versa. As chicanas com o corte horizontal são boas para o funcionamento tanto com a fase gasosa como com a fase líquida na carcaça. Os líquidos a usar devem ser limpos, caso contrário, ocorrerá sedimentação de sujeira na base de cada chicana que, por sua vez, impedirá a transferência de calor em todo o comprimento dos tubos.^{20, 21}

2.2.2.3.2.2 Chicanas em disco e doughnut

Estas são as chicanas da Figura 2.9b). O padrão de escoamento do fluido através destas chicanas é uniforme em todo o comprimento do permutador de calor, algo que não acontece com as chicanas segmentadas. O disco e o *doughnut* são recortados do mesmo prato circular e são colocados alternadamente ao longo do permutador de calor (ver Figura 2.9b)). Apesar de serem tão eficientes quanto as chicanas segmentadas nos processos de transferência de calor sem mudança de fase, estas não são usadas com tanta frequência. Isto acontece por duas razões: primeiro é que estas chicanas apresentam maiores problemas com a sedimentação da sujeira em comparação com as chicanas segmentadas, e a segunda razão é a incapacidade de ventilar o ar ou não condensáveis, no caso em que o fluido que escoar dentro da carcaça ser uma mistura de gases e haver mudança de fase, que se vão acumulando no permutador de calor.²¹

2.2.2.3.2.3 Rod baffles

Este tipo de chicanas é identificado na Figura 2.9c). Estas chicanas são varas dispostas na carcaça entres do feixe de tubos. O objectivo principal no uso destas chicanas é

reduzir os danos vibracionais que os tubos podem sofrer devido a turbulência, vibração no próprio fluido e formação de vórtices.^{20, 21}

2.2.2.4 Espelho de tubos

O espelho de tubos (ver Figura 2.10) é uma placa de metal que é devidamente furada para a entrada dos tubos e a sua soldagem. O espelho de tubos funciona como a barreira final para separar o fluido da carcaça do fluido dos tubos. Maioria dos permutadores de calor usa um único prato de metal para o espelho. No entanto, quando se opera com materiais perigosos e corrosivos, em que a mistura dos fluidos devido a fuga do fluido da carcaça para dentro do tubo ou em vice-versa seria perigosa e problemática, usam-se os espelhos duplos. Como o nome indica, estes espelhos são compostos por dois pratos metálicos.^{15, 21}

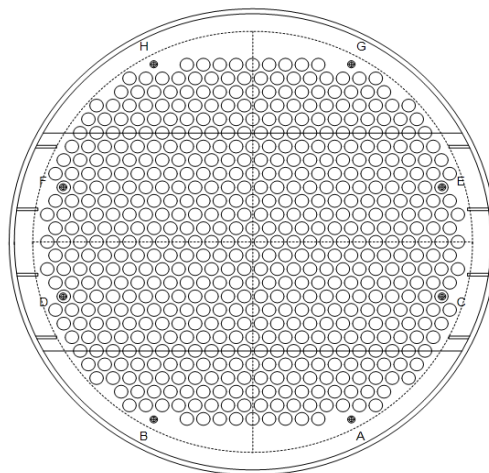


Figura 2.10. Representação esquemática do espelho de tubos dos condensadores de VCM (CIRES,Lda)

2.3 Dimensionamento dos permutadores de calor

2.3.1 Introdução e conceitos gerais

A equação geral^{15, 16, 20, 22} que descreve a transferência de calor através de uma área é:

$$Q = UA\Delta T_{ml} \quad \text{Eq. 2.1}$$

onde

- Q – calor transferido por unidade de tempo, W
- U – coeficiente global de transferência de calor, $W/(m^2\text{°C})$
- A – área de transferência de calor, m^2
- ΔT_{ml} – média logarítmica de temperaturas, força directriz, °C

A força directriz do processo calcula-se de seguinte forma:

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_{q,1} - T_{f,1}) - (T_{q,2} - T_{f,2})}{\ln \frac{(T_{q,1} - T_{f,1})}{(T_{q,2} - T_{f,2})}} \quad \text{Eq. 2.2}$$

onde T_q e T_f são as temperaturas dos fluidos quente e frio, respectivamente. O índice 1 refere-se às temperaturas de entrada, enquanto o índice 2 refere-se às temperaturas de saída. Para as configurações em contra-corrente, as temperaturas $T_{q,1}$ e $T_{q,2}$ trocam de lugar entre si na definição da média logarítmica de temperaturas.

O objectivo primário do dimensionamento dos permutadores de calor é determinar a área de superfície necessária para permutar a potência térmica especificada, usando a diferença de temperatura disponível.

O coeficiente global de transferência de calor é o recíproco da resistência global à transferência de calor, que é a soma de todas as resistências individuais. A relação entre o coeficiente global de transferência de calor e os coeficientes de transferência de calor individuais pode ser expressa por^{20, 22}:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_o} + \frac{1}{h_{od}} + \frac{d_o \times \ln \left(\frac{d_o}{d_i} \right)}{2 \times k_w} + \frac{d_o}{d_i} \times \frac{1}{h_{id}} + \frac{d_o}{d_i} \times \frac{1}{h_i} \quad \text{Eq. 2.3}$$

onde U – coeficiente global de transferência de calor baseado na área externa do tubo, $W/(m^2 \text{ } ^\circ C)$

h_o – coeficiente de filme do fluido exterior ao tubo, $W/(m^2 \text{ } ^\circ C)$

h_i – coeficiente de filme do fluido interior ao tubo, $W/(m^2 \text{ } ^\circ C)$

h_{od} – coeficiente de sujidade exterior (factor de sujidade), $W/(m^2 \text{ } ^\circ C)$

h_{id} – coeficiente de sujidade interior, $W/(m^2 \text{ } ^\circ C)$

k_w – condutividade térmica do material da parede do tubo, $W/(m \text{ } ^\circ C)$

d_i – diâmetro interior do tubo, m

d_o – diâmetro exterior do tubo, m

O valor dos coeficientes de transferência de calor individuais depende da natureza do processo de calor (condução, convecção, condensação, ebulição ou radiação), das propriedades físicas dos fluidos, dos caudais dos fluidos e da configuração da superfície onde se dá a transferência de calor. Visto que a configuração do permutador de calor não

pode ser determinada até se saber a sua área, o dimensionamento do equipamento é, de certa forma, um procedimento de tentativa e erro que envolve o cálculo iterativo.²⁰

2.3.2 Procedimento de dimensionamento

Os passos de um procedimento de dimensionamento típico são^{20, 22}:

1. Definir a taxa de transferência de calor, caudais dos fluidos e temperaturas.
2. Agrupar as propriedades dos fluidos necessários para o dimensionamento: densidade, viscosidade, condutividade térmica.
3. Decidir o tipo do permutador de calor a ser utilizado.
4. Estimar um valor para o coeficiente global de transferência de calor, U .
5. Calcular a média logarítmica de temperaturas, ΔT_{ml} .
6. Calcular a área necessária para a transferência de calor, pela Eq. 2.1.
7. Decidir a geometria do permutador de calor.
8. Calcular os coeficientes de transferência de calor individuais.
9. Calcular o coeficiente global de transferência de calor, pela Eq. 2.3, e comparar com o valor estimado. Se o valor calculado é muito diferente do valor estimado, substituir o valor estimado pelo calculado e voltar ao ponto 6.
10. Calcular a perda de carga do permutador. Se a perda de carga for insatisfatória, retornar ao ponto 7 ou 4 ou 3, nesta mesma ordem de preferência.
11. Optimizar o dimensionamento, repetir passos de 4 a 10, conforme a necessidade, para determinar a configuração mais económica do permutador que vai satisfazer os requerimentos térmicos. Usualmente, a configuração mais económica é a que apresenta a menor área de transferência de calor.

Frank (1978)^{16, 20} sugeriu seguintes regras que podem ser usadas na escolha do método de dimensionamento de condensadores parciais:

1. Não condensáveis < 0,5% - ignorar a presença de não condensáveis e usar um método para a condensação total.
2. Não condensáveis > 70% - assumir que a transferência de calor ocorre por convecção forçada apenas. Usar correlações para convecção forçada no cálculo dos coeficientes de transferência de calor, mas incluir o calor latente de condensação no cálculo de calor total permutado.
3. 0,5% < Não condensáveis < 70% - usar métodos que contabilizam ambos mecanismos de transferência de calor.

Uma vez que a quantidade inicial de não condensáveis na corrente VCG é superior a 0,5% (ver Tabela 4.1), a seguir descreve-se o método que permite dimensionar condensadores que tratam correntes com gases não condensáveis.

2.3.3 Método de Colburn-Hougen

O método de Colburn-Hougen é um dos métodos a aplicar no dimensionamento dos condensadores cuja corrente a condensar é a mistura de vapor com os gases não condensáveis. Este método requer o cálculo iterativo, ponto-a-ponto, das condições de pressão e temperatura na interface condensado-vapor. A equação em questão é:

$$q_v + q_\lambda = q_c = U\Delta T \quad \text{Eq. 2.4}$$

onde, q_v – calor sensível transferido para a superfície de condensação, W/m^2
 q_λ – calor latente transferido pelas moléculas que difundem, W/m^2
 q_c – calor transferido da superfície de condensação, através da parede do tubo e do filme do fluido de arrefecimento, para o fluido de arrefecimento, W/m^2

Explicitando cada um dos membros da Eq. 2.4, tem-se (ver Figura 2.3):

$$h_g(T_g - T_c) + k_G\lambda(p_v - p_c) = h_o(T_c - T_{cm}) = U\Delta T \quad \text{Eq. 2.5}$$

onde, h_g – coeficiente de transferência de calor através do filme de gás, $W/(m^2^\circ C)$
 h_o – coeficiente de transferência de calor combinado do filme de condensado, parede do tubo e do filme do fluido de arrefecimento, $W/(m^2^\circ C)$
 T_g – temperatura de vapor, $^\circ C$
 T_c – temperatura de condensado, $^\circ C$
 T_{cm} – temperatura do fluido de arrefecimento, $^\circ C$
 ΔT – diferença global de temperatura = $(T_g - T_{cm})$, $^\circ C$
 p_v – pressão parcial do vapor que difunde, N/m^2
 p_c – pressão do vapor a temperatura T_c , N/m^2
 λ – calor latente de condensação por unidade de massa, J/kg
 k_G – coeficiente de transferência de massa, s/m

Para calcular a área necessária do condensador, tem que se determinar valores pontuais de $U\Delta T$, como função de q_c , através do cálculo iterativo da Eq. 2.5. A integração da área debaixo da representação gráfica de q_c contra $1/U\Delta T$ dá a área necessária do condensador. Este método leva em conta a variação pontual no ΔT , U e nas velocidades mássicas, e, por conseguinte, produz valores de área de transferência de calor razoavelmente precisos.

Os termos h_g e k_G , da Eq. 2.5, podem ser obtidos a partir da analogia Chilton-Colburn, dando:

$$h_g = \frac{j_h G' C_p}{\left(\frac{C_p \mu}{k}\right)^{0.67}} \quad \text{Eq. 2.6}$$

$$k_G = \frac{j_d G'}{P_{ml} \left(\frac{\mu}{\rho D}\right)^{0.67}} \quad \text{Eq. 2.7}$$

onde,

- j_h - factor de transferência de calor
- G' - caudal por unidade de área, $kg/(m^2 s)$
- μ - viscosidade do gás, Ns/m^2
- k - condutividade térmica do gás, $W/(m^2 C)$
- j_d - factor de transferência de massa
- P_{ml} - média logarítmica das pressões parciais, N/m^2
- ρ - densidade do condensado, kg/m^3
- D - difusividade do vapor, m^2/s

Os valores de j_h e j_d são obtidos dos gráficos da Figura 7.3 (Apêndice A) e Figura 7.18 (Apêndice I), respectivamente, como funções do número de Reynolds num determinado ponto do condensador. O coeficiente de transferência de calor combinado, h_o , calcula-se combinando o coeficiente de transferência de calor do filme de condensado, h_c , através do modelo de Nusselt (secção 3.3.1), com a condutividade da parede do tubo e o coeficiente de transferência de calor do filme do fluido de arrefecimento, que neste caso foi calculado com o método de Bell (secção 3.2.1).

A partir dos valores de h_g , k_G e h_o , para a dada T_g e T_{cm} , procede-se ao cálculo iterativo de T_c , até que a Eq. 2.5 seja satisfeita. Este cálculo iterativo gera vários valores pontuais de $U\Delta T$ necessários para o cálculo da área do condensador.

2.3.4 Factores de sujidade

Os coeficientes de sujidade são vistos como resistências à transferência de calor. Estas resistências devem-se à sujidade depositada na superfície de transferência de calor pelos fluidos do processo. A matéria suja depositada, normalmente, apresenta baixa condutividade térmica, reduzindo o coeficiente global de transferência de calor. Por esta razão, os permutadores de calor devem ser sobredimensionados de forma a compensar a diminuição do coeficiente global de transferência de calor.²⁰

Os coeficientes de sujidade encontram-se disponíveis para grande variedade de aplicações dos permutadores de calor do tipo Carcaça e feixe de Tubos e podem ser consultados na literatura relacionada com a transferência de calor.

Os valores dos factores de sujidade da Tabela 7.20 do Apêndice I, são típicos dos permutadores de calor do tipo Carcaça e feixe de Tubos com os tubos planos e não *finned tubes*.²⁰

3 Métodos de cálculo dos coeficientes individuais de transferência de calor

3.1 Padrões de escoamento do fluido do lado da carcaça

A maior característica do dimensionamento dos permutadores de calor é a configuração do escoamento das correntes dentro deste. Os permutadores de calor têm mais variadas configurações, tais como o escoamento em paralelo, contracorrente, escoamento cruzado, assim como, também, a combinação simultânea destas configurações. O padrão de escoamento do fluido do lado da carcaça, num permutador de calor com chicanas segmentadas é complexo, tornando a determinação do coeficiente de transferência de calor e a perda de carga do lado da carcaça muito mais complicada do que dentro dos tubos. Como já foi referido na secção 2.2.2.3, as chicanas servem para direccionar o escoamento do fluido. Por esta razão, o tipo de escoamento que se obtém com as chicanas segmentadas é um misto entre o escoamento cruzado (entre chicanas) e o escoamento paralelo (axial) na janela da chicana (ver Figura 3.1). Na verdade nem todo o fluido segue o caminho representado na Figura 3.1. Partes do fluido fogem do padrão de escoamento ideal pelos orifícios formados por espaços vazios, necessários para a fabricação e montagem dos tubos e chicanas na carcaça. Estas correntes estão representadas na Figura 3.2. A representação esquemática das correntes na Figura 3.2, assim como a nomenclatura usada na identificação das correntes, baseia-se no modelo de escoamento proposto pelo Tinker (1951, 1958).^{15, 16, 20}

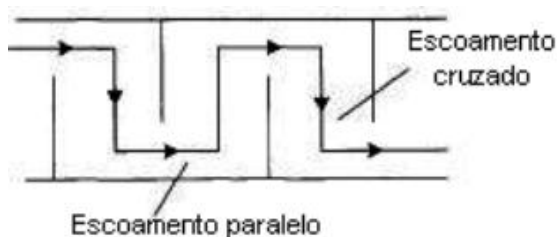


Figura 3.1. Escoamento ideal do fluido dentro da carcaça^{16, 20}

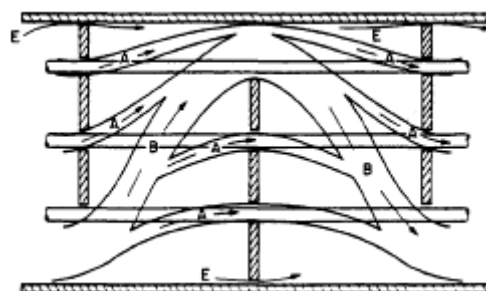


Figura 3.2. Fugas e correntes by-pass na carcaça^{16, 20}

Na Figura 3.2, a corrente:

A – corrente de fuga entre a parede externa do tubo e o espaço para tubo na chicana.

B – corrente de escoamento cruzado.

E – corrente de fuga que passa no espaço entre a chicana e a parede da carcaça (*by-pass*). O fluido desta corrente não entra em contacto com os tubos, pelo que reduz a área de transferência de calor efectiva.^{16, 20}

3.2 Coeficiente de transferência de calor dentro da carcaça (sem mudança de fase)

Os padrões de escoamento complexos, referidos em suma no ponto anterior, dificultam a determinação do coeficiente de transferência de calor e a perda de carga na carcaça. Até aproximadamente 1960 não se fizeram esforços no sentido de contabilizar as correntes de fuga e as correlações baseavam-se no caudal total das correntes. O método mais conhecido deste género é o de Kern (1950). Este método não leva em conta as correntes de fuga dentro da carcaça, é simples de aplicar e prevê estimativas razoavelmente boas para cálculos de dimensionamento preliminares. O método de análise das correntes, desenvolvido pelo Tinker (1951, 1958), revolucionou as correlações para o cálculo dos coeficientes de transferência de calor. Um dos métodos que surgiu naquela altura foi o de Bell (1963). Bell desenvolveu o método semi-analítico que contabiliza o efeito das correntes de fuga e que se pode aplicar no cálculo manual.^{16, 20}

3.2.1 Método de Bell (1963)^{20, 23}

O método de Bell estima o coeficiente de transferência de calor e a perda de carga na carcaça pela correlação para o escoamento através do feixe ideal de tubos, e o efeito das correntes de fuga é introduzido através dos factores correctivos. Esta secção apresenta o método de Bell simplificado e adaptado ao cálculo manual.

3.2.1.1 Coeficiente de transferência de calor

O coeficiente de transferência de calor do lado da carcaça é dado por:

$$h_s = h_{oc} F_n F_w F_b F_L \quad \text{Eq. 3.1}$$

onde, h_{oc} – coeficiente de transferência de calor para o fluxo cruzado ideal (sem correntes de fuga), $W/(m^2 \text{ } ^\circ C)$

F_n – factor correctivo da linha de tubos

F_w – factor correctivo da janela de chicana

F_b – factor correctivo para a corrente *by-pass*

F_L – factor correctivo para as correntes de fuga entre tubo e chicana, chicana e carcaça

3.2.1.2 Coeficiente de transferência de calor para fluxo cruzado ideal (h_{oc})

O coeficiente de transferência de calor para o escoamento cruzado através do feixe ideal de tubos pode ser calculado com auxílio do factor de transferência de calor j_h (ver Figura 7.3 do Apêndice A) pela seguinte expressão:

$$\frac{h_{oc}d_o}{k_f} = j_h Re Pr^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0.14} \quad \text{Eq. 3.2}$$

A fracção $(\mu/\mu_w)^{0.14}$ é o factor correctivo de viscosidade que pode ser ignorado nos casos em que o permutador de calor opera com fluidos cuja viscosidade não varia muito com a temperatura.

3.2.1.3 Factor de correcção da linha de tubos (F_n)

Este factor correctivo depende do tipo de escoamento em que se encontra o fluido (turbulento, transiente, laminar) e por conseguinte do número de Reynolds. Para três regimes de escoamento tem-se:

1. $Re > 2000$ (regime turbulento), ler F_n na Figura 7.4 do Apêndice A.
2. $100 < Re < 2000$ (regime transiente), $F_n = 1$.
3. $Re < 100$ (regime laminar), $F_n \propto (N'_c)^{-0.18}$,

onde N'_c é o número de linhas de tubos cruzadas pelo fluido em série em todo o comprimento da carcaça que depende do número de chicanas presentes no permutador de calor.

3.2.1.4 Factor de correcção da janela (F_w)

Este factor correctivo é função da área de transferência de calor disponível na janela da chicana e da área de transferência de calor total disponível na chicana. F_w encontra-se representado na Figura 7.5 do Apêndice A em função de R_w , que é, por sua vez, a razão entre o número de tubos na janela da chicana e o número total de tubos no condensador.

$$R_w = \frac{2 \times N_w}{N_t} \quad \text{Eq. 3.3}$$

onde, N_w – número de tubos na área da janela de chicana
 N_t – número total de tubos no condensador

O número de tubos na área da janela de chicana calcula-se através da seguinte equação:

$$N_w = N_t \times R'_a \quad \text{Eq. 3.4}$$

O R'_a tira-se do gráfico da Figura 7.8 do Apêndice A, onde este se encontra representado em função do corte da chicana.

3.2.1.5 Factor correctivo para o *by-pass* (F_b)

Este factor corrige a corrente *by-pass* principal, entre o feixe de tubos e a parede da carcaça. Para o caso em que o permutador de calor não apresenta placas de vedação contra as correntes de *by-pass*, F_b obtém-se da Figura 7.6 do Apêndice A, onde este é representado em função do quociente entre a área do espaço livre entre o feixe de tubos e a parede da carcaça (A_b) e a área máxima para o escoamento da corrente cruzada (A_s) (ver Figura 7.2 do Apêndice A).

3.2.1.6 Factor de correcção para fugas (F_L)

Este factor corrige as fugas de fluido através dos espaços entre tubo e chicana, assim como, entre a chicana e a parede da carcaça. Calcula-se de seguinte forma:

$$F_L = 1 - \beta_L \left[\frac{(A_{tb} + 2A_{sb})}{A_L} \right] \quad \text{Eq. 3.5}$$

onde β_L obtém-se da Figura 7.7 do Apêndice A. Este factor é representado em função do quociente entre A_L e A_{sb} .

A_{tb} – área do espaço livre entre tubo e chicana (ver Figura 7.1 do Apêndice A).

A_{sb} – área do espaço livre entre a chicana e a parede da carcaça (ver Figura 7.1 do Apêndice A).

A_L – área total de fugas ($A_{tb} + A_{sb}$).

3.3 Coeficiente de transferência de calor nos tubos verticais (com mudança de fase)

O mecanismo comum para transferência de calor nos condensadores industriais é a condensação em filme. Quando o vapor condensa numa superfície vertical, o filme de condensado escoia para baixo devido à força de gravidade. Este escoamento pode ser retardado pela viscosidade do próprio líquido. O escoamento do filme de condensado é,

geralmente, laminar e o calor passa através do filme do condensado pela condução. A equação fundamental que descreve a condensação em filme foi desenvolvida pelo Nusselt (1916) e ainda hoje é uma referência para o dimensionamento dos condensadores. O efeito de turbulência no filme foi estudado por Butterworth (1978) e Taborek (1983).^{16, 20}

3.3.1 Método de Nusselt

A teoria de Nusselt assume que o escoamento do filme de condensado é laminar e que a transferência de calor através do filme dá-se apenas por condução. Assume também que a temperatura da camada inferior do filme de condensado que está em contacto com a superfície fria é igual à temperatura da superfície, e que a temperatura da camada superior do filme que está em contacto com o vapor é igual à temperatura do vapor. Nos condensadores reais, a teoria de Nusselt só se aplica no caso de operação com baixos caudais de líquido e vapor, e onde o filme de condensado não é perturbado.^{16, 20}

O modelo de Nusselt diz que, para a condensação dentro de tubos verticais, o valor médio do coeficiente de filme de transferência de calor através de toda a superfície do tubo pode ser calculado por:

$$\bar{h} = 0,926 k_L \sqrt[3]{\frac{\rho_L (\rho_L - \rho_v) g}{\mu_L \Gamma}} \quad \text{Eq. 3.6}$$

onde,

- \bar{h} – coeficiente médio de condensação, $W/(m^2 \text{ } ^\circ C)$
- k_L – condutividade térmica do condensado, $W/(m \text{ } ^\circ C)$
- ρ_L – densidade do condensado, kg/m^3
- ρ_v – densidade do vapor, kg/m^3
- μ_L – viscosidade do condensado, $kg/(m \text{ } s)$
- g – aceleração gravítica, $9,81 \text{ } m/s^2$
- Γ – caudal de condensado por unidade de perímetro de tubo, $kg/(m \text{ } s)$

$$\Gamma = \frac{W_c}{N_t \pi d_i} \quad \text{Eq. 3.7}$$

onde,

- W_c – caudal total de condensado, kg/h

A Eq. 3.7 só se aplica aos casos em que o número Reynolds do filme de condensado é inferior a 30. O número de Reynolds para o filme de condensado é dado por:

$$Re_c = \frac{4\Gamma}{\mu_L} \quad \text{Eq. 3.8}$$

Acima do valor 30, a ondulação e turbulência dentro do filme tornam-se importantes, aumentando o coeficiente de transferência de calor. Desta forma, para $Re_c > 30$, Eq. 3.8 dá estimativas conservativas (seguras) do coeficiente de transferência de calor.^{16, 20}

Além disso, podem ocorrer diferenças entre temperaturas de vapor e filme, invalidando a assumption feita pelo Nusselt na formulação da sua correlação. Esta diferença de temperaturas pode ser ignorada, excepto quando a corrente de vapor a condensar contem gás não condensável.

Os efeitos da turbulência e ondulação no filme de condensado, entre outros, foram estudados pelo Nazhat¹⁸ que também incluiu no seu estudo o efeito da tensão superficial e da curvatura da superfície. Nazhat propõe seguinte correcção ao modelo de Nusselt:

$$\frac{\bar{h}_c}{\bar{h}} = 0,87 Re_c^{0,07} \quad \text{Eq. 3.9}$$

onde, \bar{h}_c – coeficiente médio de condensação corrigido, $W/(m^2\text{°C})$

4 Apresentação e discussão dos resultados

Com o fim de simular o comportamento da unidade de condensação de VCM recorreu-se ao simulador comercial *Aspen Plus* 2006.5, desenvolvido pela Aspen Technology, Inc.. Para a determinação das propriedades físicas e termodinâmicas das correntes e para o dimensionamento térmico dos condensadores utilizaram-se o *Aspen Properties* e *Aspen Hetrn*, respectivamente. Utilizou-se, também, o *Aspen Teams* para se conseguir o *layout* dos condensadores e dos tubos (ver Figura 4.2, Figura 4.3 e Figura 4.4).

A descrição mais detalhada sobre a utilização do simulador encontra-se no Apêndice C.

Figura 4.1 apresenta os dois estágios de condensação com as respectivas correntes. Este esquema do processo é descrito em mais pormenor na secção 4.3. Este esquema apresenta a disposição do equipamento e as correntes envolvidas na unidade de condensação de dois estágios da Figura 2.1.

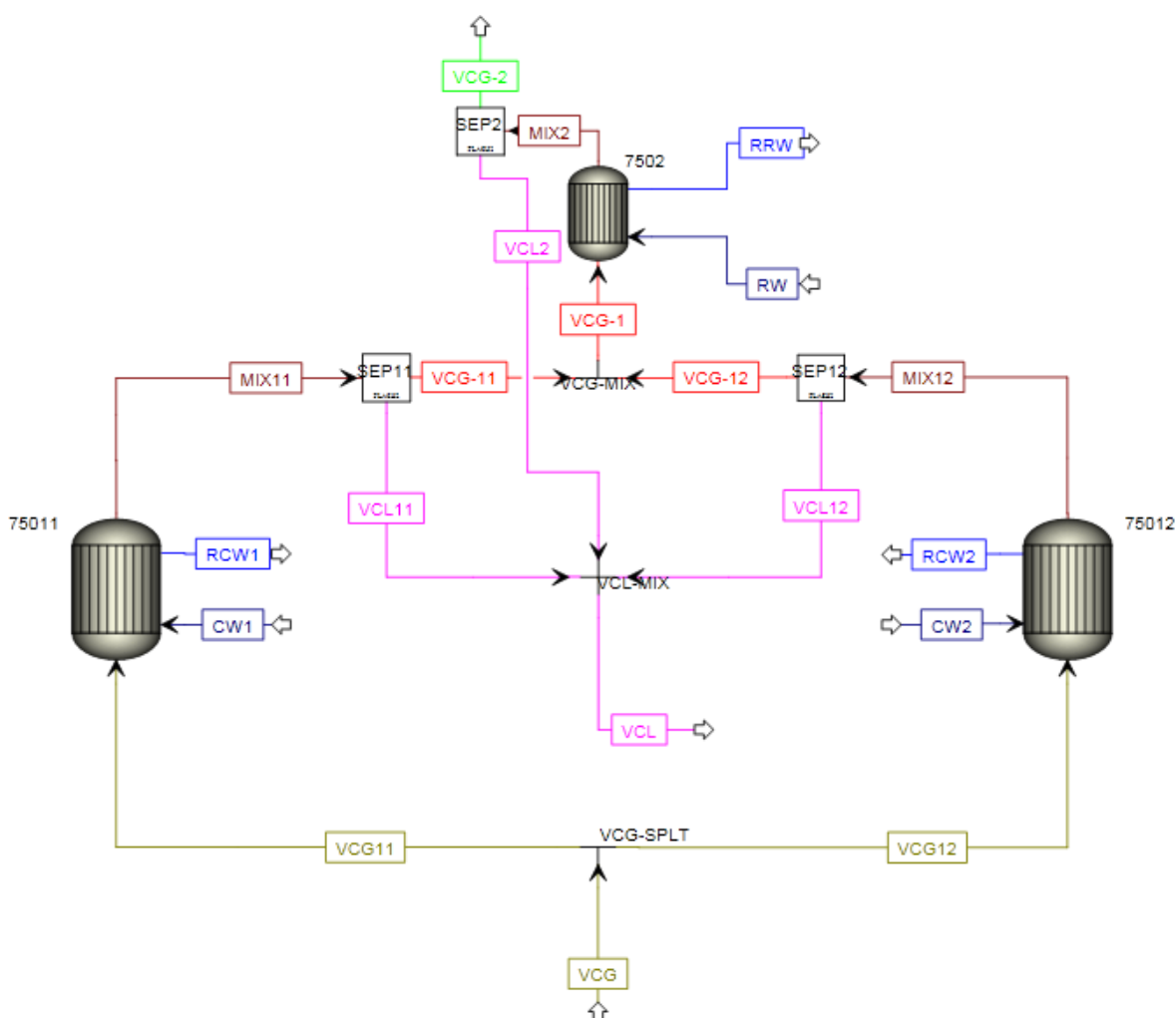


Figura 4.1. Esquema de processo usado na simulação

O objectivo foi de reproduzir no simulador o desempenho real dos condensadores. Para isso foi necessário calcular os coeficientes globais de transferência de calor (U) teóricos (conforme indicado na secção 2.3 e 3) e ajustar estes valores, conforme a necessidade, aos valores reais. Estes ajustes são conseguidos através da introdução no simulador dos coeficientes de sujidade característicos ao processo, perdas de carga e da condutividade térmica do material da parede do tubo (ver Tabela 7.5 e Tabela 7.6, do Apêndice E, para identificar o material da parede dos tubos dos condensadores de ambos estágios, e Tabela 7.21 para a consulta da respectiva condutividade térmica).

4.1 Caracterização das condições de operação da unidade de condensação

Para iniciar o processo de simulação foram necessárias as condições de operação do primeiro e segundo estágios de condensação e as composições em massa das correntes VCG (saída do gasómetro), VCG1 (saída do primeiro estágio/entrada do segundo estágio) e VCG2 (saída do segundo estágio). As condições de operação são verificadas na sala de controlo. Quanto às composições das correntes, foram colhidas cinco amostras de cada uma das correntes nos dias e condições de operação diferentes. Todas as amostras foram sujeitas às cromatografias gasosas para a identificação e quantificação dos componentes das correntes. A Tabela 4.1 apresenta as composições médias das cinco colheitas supramencionadas e as condições de entrada da corrente VCG no primeiro estágio de condensação.

Tabela 4.1. Composições das correntes e as condições de entrada de VCG na unidade de condensação

Corrente	% (m/m)					T (°C)	P (bar)	F (kg.h ⁻¹)
	CM	CE	N_2	O_2	VCM			
VCG	0,780	0,928	0,574	0,154	97,565	48	7	10000
VCG1	1,247	0,044	20,131	0,925	77,652	-----	-----	-----
VCG2	1,422	0,023	43,315	2,503	52,736	-----	-----	-----

A composição em VCM é calculada como a diferença entre 100% e a soma das composições dos restantes componentes da corrente.

As condições de operação médias do processo referem-se aos fluidos de arrefecimento CW e RW, do primeiro e segundo estágios de condensação, respectivamente. Estas encontram-se resumidas na Tabela 4.2.

Tabela 4.2. Condições de operação dos fluidos de arrefecimento dos dois estágios de condensação

Estágio de condensação	Corrente	T (°C)	P (bar)	F (kg.h ⁻¹)
1º	CW	18,3	5	63000
	RCW	23,3	5	63000
2º	RW	8	5	11000
	RRW	9	5	11000

4.2 Determinação da temperatura de condensação de VCG

Depois de identificação da composição da corrente que entra na instalação de condensação, VCG, calculou-se a sua temperatura de condensação (*dew-point*). O modelo termodinâmico escolhido para descrever o comportamento da mistura em questão, tanto no cálculo de *dew-point* como na simulação posterior, foi a equação de estado Redlich-Kwong-Soave com os parâmetros de interacção binários fornecidos pela biblioteca termodinâmica do *Aspen Plus*. Este modelo termodinâmico é descrito em mais pormenor no Apêndice D e foi escolhido com base no artigo científico que compara a eficácia de vários modelos termodinâmicos.²⁴

Tendo-se efectuado o cálculo da temperatura de condensação com o auxílio de *Aspen Plus*, foi determinado que a temperatura de condensação da corrente VCG, para 7 bar e a composição referida na Tabela 4.1 para VCG, é de 45,6°C. Assim, comparando a temperatura de entrada de VCG na instalação de condensação, da Tabela 4.1, com a temperatura de condensação calculada, conclui-se que a corrente entra a uma temperatura ligeiramente superior à da saturação, pelo que se pode dizer que VCG entra na instalação de condensação ligeiramente sobreaquecido.

4.3 Implementação da geometria dos condensares no software e o dimensionamento térmico dos mesmos

Como foi referido anteriormente, a implementação da geometria dos condensadores de ambos os estágios foi feita em *Aspen Hetran*, o aplicativo que se destina exclusivamente ao dimensionamento térmico dos permutadores de calor de mais variadas configurações, com base na geometria especificada. A geometria implementada no *Aspen Hetran* é, posteriormente, importada e usada na simulação do processo de condensação em *Aspen Plus*.

Os condensadores em questão são do tipo Carcaça e de feixe de Tubos. No dimensionamento dos condensadores consultou-se as fichas técnicas e os desenhos mecânicos de cada um deles. A Figura 4.2 e a Figura 4.3 mostra o *layout* dos condensadores de ambos estágios, conseguido com o *Aspen Teams*.

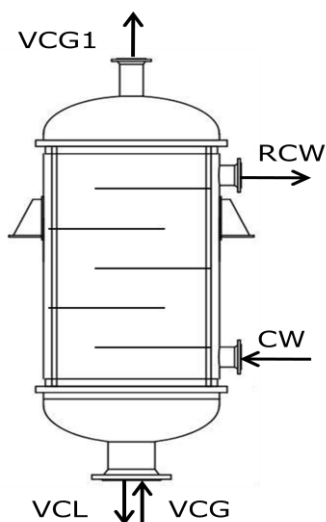


Figura 4.2. Representação esquemática de um dos condensadores do 1º estágio e das respectivas correntes de entrada e saída.

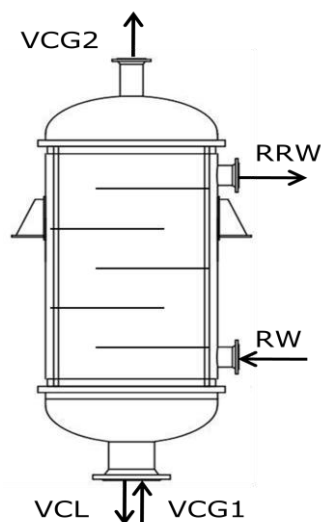


Figura 4.3. Representação esquemática do condensador do 2º estágio e das respectivas correntes de entrada e saída.

O TEMA dos condensadores em questão é BEM, classe C (ver Figura 2.6). O Apêndice E contém as folhas de especificações técnicas pormenorizadas de cada um dos condensadores. É de salientar que para os condensadores do primeiro estágio apenas existe uma folha de especificação técnica visto que ambos são iguais em dimensões e trabalham nas mesmas condições. A Tabela 4.3 apresenta as dimensões mais relevantes da carcaça dos condensadores de ambos estágios.

Tabela 4.3. Principais dimensões da carcaça dos condensadores de ambos os estágios

Dimensão / Característica	1º estágio	2º estágio
Diâmetro interno do involucro (mm)	1100	750
Espessura do espelho (frente/trás) (mm)	55/55	40/40
Número de chicanas	5	5
Diâmetro da chicana (mm)	1096	746
Corte da chicana (mm)	244	164
Corte da chicana (%)	22,3	22
Espaçamento entre chicanas (mm)	276,5	190

A Figura 4.4 apresenta o *layout* dos tubos no espelho, o padrão da disposição dos tubos na carcaça dos condensadores e o espaçamento entre os tubos.

A Tabela 4.4 apresenta as dimensões dos tubos mais relevantes para o desenho dos condensadores dos dois estágios de condensação.

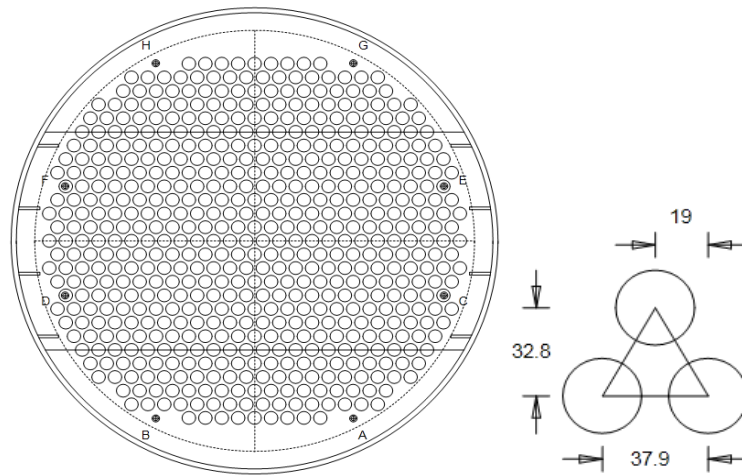


Figura 4.4. Layout dos tubos no respectivo espelho de tubos

Como já foi referido na secção 2.2.2, o *pitch* (P_t) é o espaçamento entre os centros dos tubos. Como se pode ver na Figura 4.4, o *pitch* dos tubos nos condensadores existentes é de 37,9 mm.

Tabela 4.4. Principais dimensões dos tubos dos condensadores de ambos os estágios

Dimensão / Característica	1º estágio	2º estágio
Altura dos tubos (mm)	1800	1250
Número dos tubos	580	280
Diâmetro externo dos tubos (mm)	31,8	31,8
Espessura da parede do tubo (mm)	2	2
Número dos tirantes	8	8
Diâmetro do tirante (mm)	12	12

A área de transferência de calor é a área lateral total dos tubos de cada um dos condensadores. Uma vez que os tubos são cilíndricos, a área lateral calcula-se de seguinte forma (em m²):

$$A = 2\pi \left(\frac{d_o \times 10^{-3}}{2} \right) [(L \times 10^{-3}) - (2 \times T_{sh} \times 10^{-3})] N_t \quad \text{Eq. 4.1}$$

onde, L – comprimento dos tubos, mm

T_{sh} - espessura do espelho de tubos, mm

N_t – número total de tubos no condensador

É digno de nota que no cálculo da área de transferência de calor, a espessura dos espelhos de tubos é subtraída à altura total dos tubos, uma vez que a parte da altura do tubo que se encontra dentro do espelho não fornece área para a transferência de calor.

Tendo-se feito os cálculos, determinou-se que a área de transferência de calor de cada um dos condensadores do 1º estágio é $97,9\text{m}^2$ e do condensador do segundo estágio é $34,7\text{m}^2$.

O padrão de escoamento nos condensadores de ambos estágio é um misto entre o escoamento cruzado e paralelo. Tanto o VCG/VCG1 e CW/RW, no 1º e 2º estágio respectivamente, entram na parte inferior do condensador e sobem dentro do equipamento até à saída. O gás escoar dentro dos tubos, enquanto o fluido de arrefecimento escoar na carcaça do condensador. Por esta razão a condensação ocorre em filme dentro dos tubos verticais. A condensação é do tipo *knockback reflux*, uma vez que o filme de condensado, quando se forma na superfície da parede interior do tubo, escoar para baixo, contrário à direcção de escoamento do gás, por acção da força gravítica. Na Figura 4.1 encontra-se o esquema do processo de condensação com as respectivas correntes. É de salientar que os blocos SEP na realidade não existem. Optou-se por adicionar estas unidades de separação porque, apesar de Aspen Plus ser capaz de simular o comportamento dos condensadores com a condensação *knockback reflux*, o simulador não possui na biblioteca de equipamentos nenhum permutador de calor de Carcaça e feixe de Tubos que permita adicionar 2 correntes de saída para 1 de entrada (VCG a entrar no condensador e VCL e VCG1 a sair do condensador, VCL pela cauda e VCG1 pelo topo de equipamento). Por esta razão, adicionou-se as unidades SEP que são separadores *flash* adiabáticos que funcionam a mesma pressão que os condensadores. Nestes separadores ocorre a separação do VCM condensado do gás que não condensou e prossegue na unidade.

Tendo-se definido a geometria dos condensadores no *software*, prosseguiu-se ao cálculo dos coeficientes de transferência de calor para o gás e fluido de arrefecimento. No cálculo manual utilizou-se o método de Bell, descrito na secção 3.2.1, para o coeficiente de transferência de calor na carcaça, e o método de Nusselt corrigido, descrito na secção 3.3.1, para o coeficiente de transferência de calor nos tubos. No cálculo computacional escolheu-se o modelo *Mass transfer film* para a caracterização da transferência de calor durante a condensação, uma vez que, como foi descrito na secção 2.2.1, a transferência de massa envolvida na difusão do vapor de VCM através do filme de gás é o fenómeno

limitante no processo de condensação. O modelo *Mass transfer film* é o modelo de filme baseado na correlação de Colburn-Hougen (ver secção 2.3.3) para misturas de vapor com gases não condensáveis. A experiência e pesquisa dos autores indica que se a composição da corrente gasosa é bem conhecida, o modelo *Mass transfer film* é o mais exacto.²⁵ Para o cálculo dos coeficientes de filme dos fluidos, tanto do lado da carcaça como do lado de tubos, escolheu-se o método de Taborek(1983)^{26, 27}, que é uma referência na indústria.²⁵

Tabela 4.5. Resultados do cálculo dos coeficientes de transferência de calor manual e computacional

Método	Forma de Cálculo			
	Modelo das Resistências		Colburn-Hougen	
	Carcaça	Tubos	Carcaça	Tubos
	Bell	Nusselt	Taborek	
\bar{h} , (W.m ⁻² °C ⁻¹)	3296,8	1257,7	2618,5	1041,6
\bar{U} , (W.m ⁻² °C ⁻¹)	626,4		323,1	

No cálculo manual, o coeficiente médio de transferência de calor (\bar{U}) foi calculado com a Eq. 2.3, enquanto no cálculo computacional foi aplicado o método de Colburn-Hougen, Eq. 2.5. É de referir que o valor de \bar{U} estimado pelo método convencional é o dobro do valor predito pelo método de Colburn-Hougen. A razão disto é que o método convencional de cálculo do coeficiente global de transferência de calor não leva em conta a presença dos gases não condensáveis, cujo efeito é a diminuição do coeficiente global de transferência de calor do processo.

4.4 Simulação do processo de condensação

Tendo-se estudado a composição da corrente a condensar, as condições de operação de ambos os estágios de condensação e reproduzido a geometria de cada um dos condensadores em Aspen Hetran, avançou-se para a simulação do processo de condensação propriamente dito. Para isso, como já foi mencionado, foi necessário importar a geometria implementada em Aspen Hetran para dentro do simulador. Assim, a simulação do processo foi feita em Aspen Plus utilizando o modelo Hetran.

Com o fim de confirmar a veracidade dos valores de coeficientes de transferência de calor de filme de cada fluido e do coeficiente de transferência de calor global, simulou-se o comportamento dos condensadores a operar com a CW a 18°C à entrada no condensador. Os resultados da simulação efectuada encontram-se na Tabela 4.6.

Tabela 4.6. Resultados da simulação de condensação com CW a 18°C

Estágio de condensação	Correntes	T_{in} (°C)	T_{out} (°C)	%(m/m) VCM em VCG1
1º	CW / RCW	18	23,2	-----
	VCG / VCG1	48	27,1	77,4
2º	RW / RRW	8	8,9	-----
	VCG1 / VCG2	27,1	10	57,8

Comparando as temperaturas de saída dos fluidos e a %(m/m)VCM das correntes VCG1 e VCG2 com os dados da Tabela 4.1 e Tabela 4.2, conclui-se que o simulador está ajustado para reproduzir e prever com precisão o comportamento de ambos os estágios de condensação, permitindo efectuar todos os estudos de sensibilidade necessários.

4.4.1 Estudos de sensibilidade da unidade de condensação

4.4.1.1 Desempenho durante um ano de produção

Considerando que o primeiro estágio de condensação é arrefecido com a CW, cuja temperatura depende das condições atmosféricas (temperatura e humidade), o estudo de desempenho da instalação de condensação consiste em simular o processo para todas as temperaturas que ocorrem na CW ao longo do ano. O intervalo de temperaturas em questão é de 25°C (condição máxima de verão) a 10°C (condição de inverno). Os resultados obtidos encontram-se na Tabela 7.7 do Apêndice F e são representados graficamente na Figura 4.5 e Figura 4.6. A Figura 4.5 apresenta a evolução da composição mássica da corrente VCG1 em VCM e a variação do caudal total da mesma.

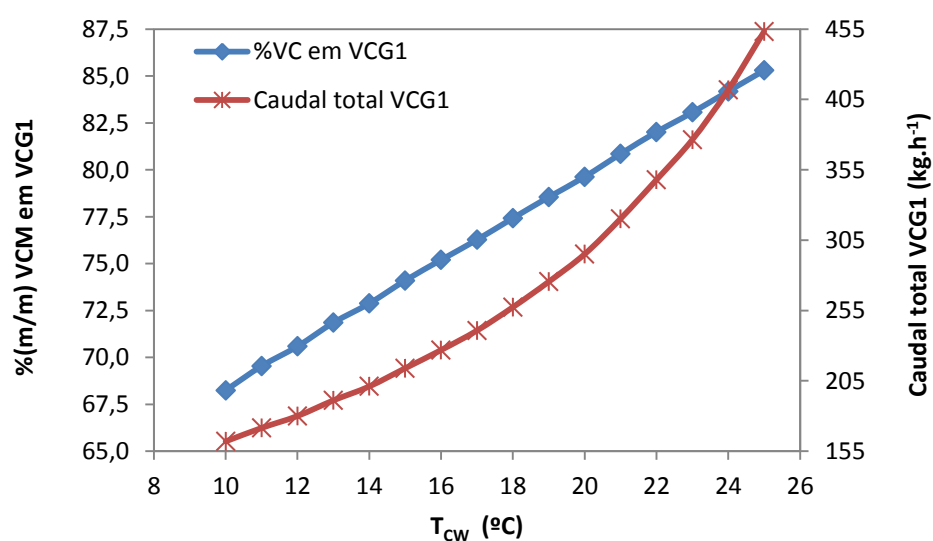


Figura 4.5. Efeito da temperatura de CW sobre o 1º estágio

A partir do gráfico da Figura 4.5 é possível concluir que com a diminuição da temperatura de CW a corrente VCG1 fica cada vez mais pobre em VCM. Este efeito observa-se no perfil da curva que descreve a variação do caudal mássico total de VCG1. Deste modo, para a gama de temperaturas de CW entre 25°C e 10°C, a percentagem mássica de VCM varia entre 85% e 68%, respectivamente. Portanto, considerando que o intervalo de temperaturas de 25°C à 10°C cobre todas as temperaturas que ocorrem na CW durante um ano de operação, conclui-se que ao longo de um ano a variação de composição mássica de VCG1 em VCM varia cerca de 20%(m/m). É de referir que a variação da %(m/m)VCM na corrente apresenta perfil linear em todo o intervalo de variação da T_{CW} .

No seguimento à Figura 4.5, a Figura 4.6 apresenta a variação da %(m/m)VCM e do caudal total da corrente VCG2 em função da variação da T_{CW} .

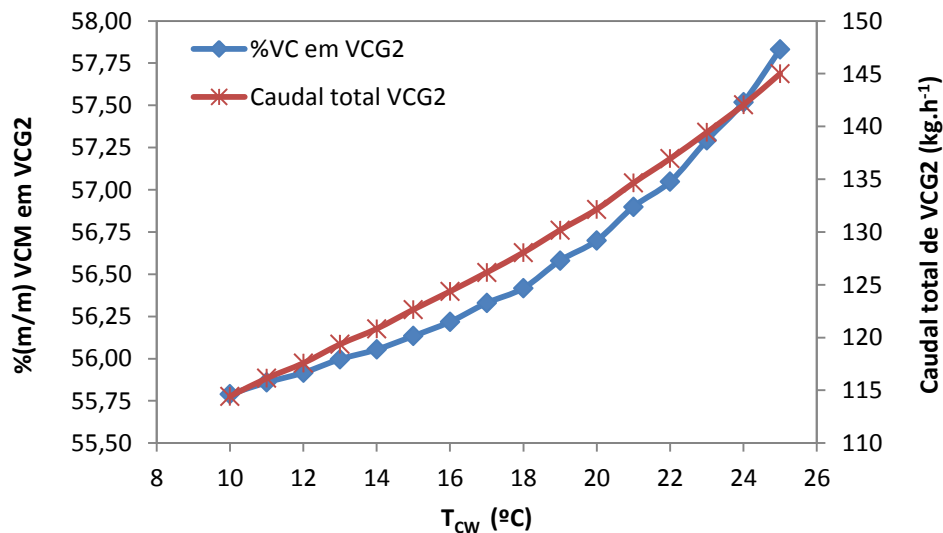


Figura 4.6. Efeito da temperatura de CW sobre o 2º estágio

A partir do gráfico da Figura 4.6 pode-se concluir que, para o mesmo intervalo de T_{CW} em estudo, a %(m/m)VCM na corrente VCG2 varia muito menos, quando comparada à variação de %(m/m)VCM no primeiro estágio. Nas condições de operação menos favoráveis (condições de verão) a %(m/m)VCM na corrente de saída da unidade de condensação é 57,8%(m/m), enquanto nas condições de operação de inverno a %(m/m)VCM na mesma corrente é 55,8%(m/m). Portanto, pode-se concluir que o efeito da variação da T_{CW} sobre o processo de condensação no segundo estágio é marginal, variando a %(m/m)VCM, ao longo de um ano, apenas 2%(m/m). É também de referir que para o intervalo de T_{CW} entre 16°C e 25°C observa-se a taxa acentuada de remoção de

VCM da corrente VCG2. De 16°C para baixo, a $\%(m/m)VCM$ na corrente parece começar a estabilizar.

Há três factores que contribuem para esse comportamento. Primeiro: com temperaturas de CW mais baixas condensa mais VCM. Assim, nas condições de operação de inverno, o segundo estágio tem menos VCM para condensar do que nas condições de verão.

Segundo: a maior condensação no primeiro estágio significa que os não condensáveis, N_2 e O_2 , vão tendo cada vez maior influencia na condensação do segundo estágio. Como já foi referido na revisão bibliográfica, os não condensáveis formam uma camada de gás à superfície do filme de condensado, funcionando como barreira à condensação. Este efeito faz diminuir o coeficiente global de transferência de calor do processo, diminuindo também a taxa de remoção de VCM da corrente gasosa.

Terceiro: a força motriz de condensação no 2º estágio é menor para T_{CW} mais baixas. Considerando que a temperatura de VCG1 à entrada do 2º estágio de condensação é mais baixa nas condições de operação de inverno do que nas de verão, e que a T_{RW} é constante (8°C), pode-se concluir que quanto mais baixa for a temperatura de VCG1, à entrada do 2º estágio, menor será a força motriz do processo de condensação nesse mesmo estágio, afectando negativamente a remoção de VCM da corrente.

4.4.1.2 Variação da área de transferência de calor do 2º estágio

O 2º estágio de condensação, na sua essência, é uma rectificação ao processo de condensação do 1º estágio. Ou seja, o objectivo do 2º estágio é condensar o VCM que não condensa no 1º estágio.

Portanto, o primeiro estudo de sensibilidade proposto é o de aumento da área de transferência de calor do 2º estágio. Este estudo tem como objectivo averiguar se o aumento da área do 2º estágio permitirá condensar mais VCM, diminuindo, por conseguinte, a $\%(m/m)VCM$ na corrente de saída da unidade de condensação (VCG2).

O estudo foi efectuado para as condições de operação de verão, estudando-se assim o efeito do aumento da área no pior cenário de condensação. Os resultados do estudo efectuado encontram-se na Tabela 7.8 do Apêndice F. A representação gráfica dos resultados está patente no gráfico da Figura 4.7.

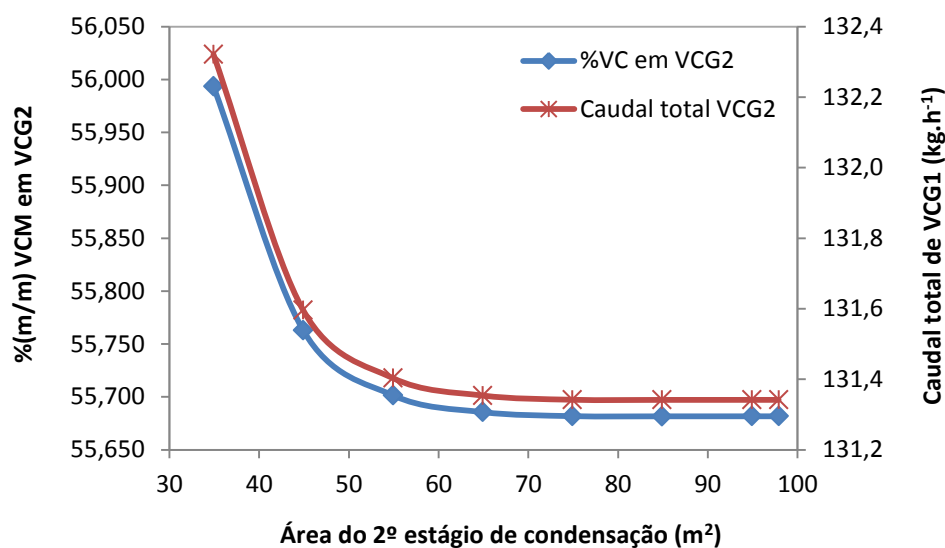


Figura 4.7. Efeito da variação da área do 2º estágio sobre a condensação no 2º estágio

A partir do gráfico da Figura 4.7 é possível constatar-se que, para as condições de operação de verão, o 2º estágio de condensação não apresenta grande margem para o aumento da área de transferência de calor. Assim, a partir de, aproximadamente, 55m² deixa de ocorrer a condensação de VCM, uma vez que as curvas representativas de %(m/m)VCM e de caudal mássico total de VCG2 estabilizam, atingindo uma assintota.

É de referir também que o estudo de sensibilidade anterior demonstrou que o 2º estágio de condensação opera com excesso da área de transferência de calor, nas condições de inverno.

Considerando estes resultados, conclui-se que o aumento da área do 2º estágio não é a solução para a optimização do desempenho da unidade de condensação.

4.4.1.3 Variação da área de transferência de calor do 1º estágio

Propôs-se estudar a influência que o aumento da área do primeiro estágio teria sobre o processo de condensação. O critério de paragem para este estudo foi o limite máximo de aproximação entre temperaturas de CW e VCG1. Este critério permite assegurar que não ocorra o cruzamento de temperaturas entre ambos os fluidos. O critério pode ser definido pelo engenheiro do projecto, tendo em conta que quanto mais baixo for o limite de aproximação de temperaturas, maior será a área do condensador. O critério estabelecido foi de 1°C. A Tabela 7.9 do Apêndice F apresenta os resultados do estudo de sensibilidade efectuado.

O estudo de sensibilidade foi detido no caso em que cada um dos condensadores tem $147,9 \text{ m}^2$ de área de transferência de calor, porque acima desse valor o limite máximo de aproximação das temperaturas é excedido. Este caso equivale a ter três condensadores no primeiro estágio, cada um com $97,9 \text{ m}^2$ (área dos condensadores actuais).

A Figura 4.8 e Figura 4.9 apresentam a representação gráfica dos resultados obtidos. O gráfico da Figura 4.8 representa a evolução da composição da corrente VCG1 em VCM e do caudal total da respectiva corrente.

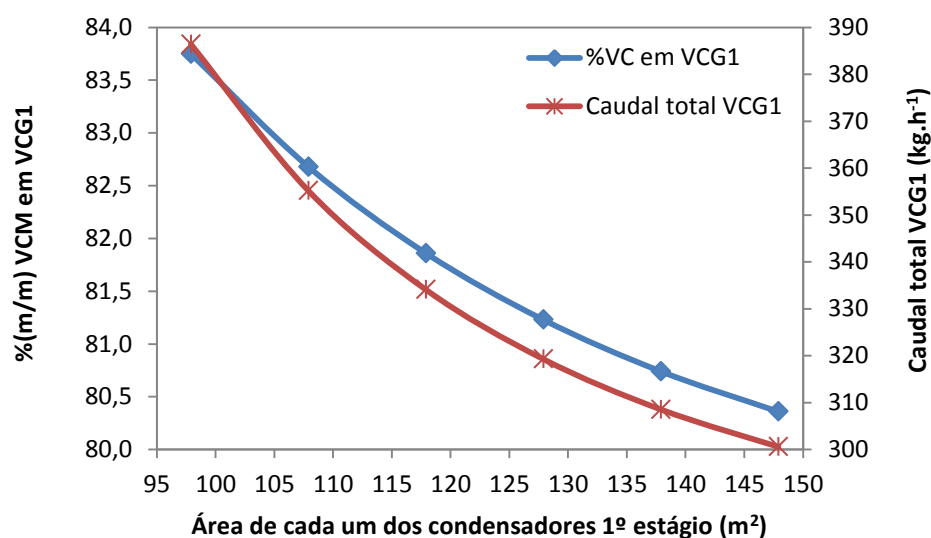


Figura 4.8. Efeito do aumento da área do 1º estágio sobre a condensação no 1º estágio

A partir do gráfico da Figura 4.8, é possível concluir que o aumento da área de transferência de calor no primeiro estágio possibilita maior remoção de VCM da corrente VCG1. No entanto, este ganho de VCM condensado (em $\%(m/m)$) é muito pequeno. De acordo com os resultados obtidos, a instalação de mais um condensador no 1º estágio, com a área igual à dos existentes, diminui a $\%(m/m)$ VCM na corrente VCG1 de, cerca de, $84\%(m/m)$ (caso actual, dois condensadores de $97,9 \text{ m}^2$ cada um) para $80,5\%(m/m)$ (1º estágio com três condensadores de $97,9 \text{ m}^2$ cada um).

Portanto, com a instalação de mais um condensador no 1º estágio, nas condições de verão, conseguir-se-ia condensar mais $3,5\%(m/m)$ de VCM.

O gráfico da Figura 4.9 apresenta a evolução da composição da corrente VCG2 em VCM e do caudal total da respectiva corrente.

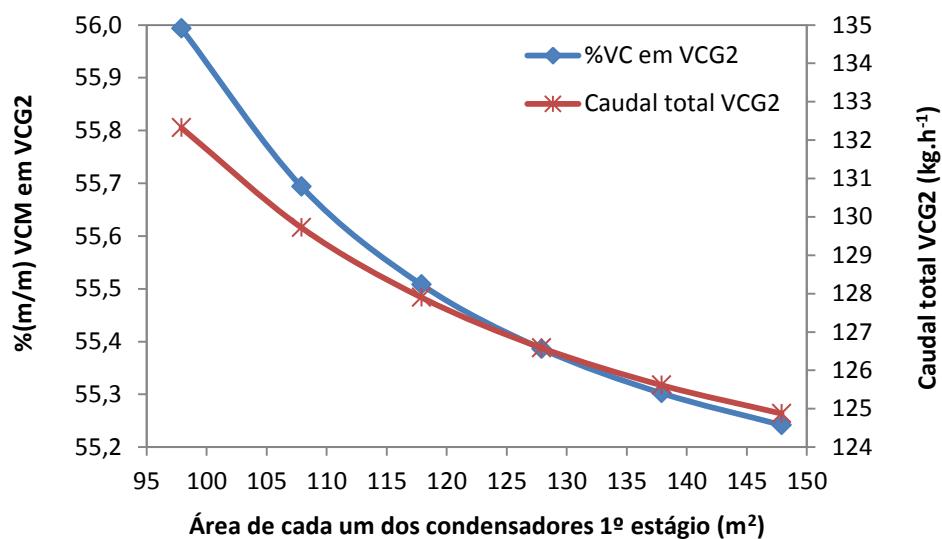


Figura 4.9. Efeito do aumento da área do 1º estágio sobre a condensação no 2º estágio

Com base no gráfico da Figura 4.9, verifica-se que o efeito do aumento da área de transferência de calor do 1º estágio sobre o processo de condensação no 2º estágio é semelhante ao efeito produzido sobre o 1º estágio de condensação, representado na Figura 4.8.

No entanto, o ganho a nível de VCM condensado no 2º estágio é de cerca de 0,7%(m/m). Considerando que, conforme referido antes, o estudo em questão foi efectuado para as condições de operação de verão e que o caudal mássico de VCG1 a entrar no 2º estágio é 453,3kg.h⁻¹ (ver Tabela 7.7 do Apêndice F), conclui-se que o ganho de 0,7%(m/m) representa os 3,17kg.h⁻¹ de VCM extra condensado no 2º estágio.

4.4.1.4 Efeito de compressão da corrente VCG1

Propõe-se efectuar um estudo cujo objectivo é determinar a influência da variação de pressão da corrente VCG1 na condensação no segundo estágio. Este estudo consiste em instalar um compressor entre 1º e 2º estágio de condensação (ver Figura 4.10).

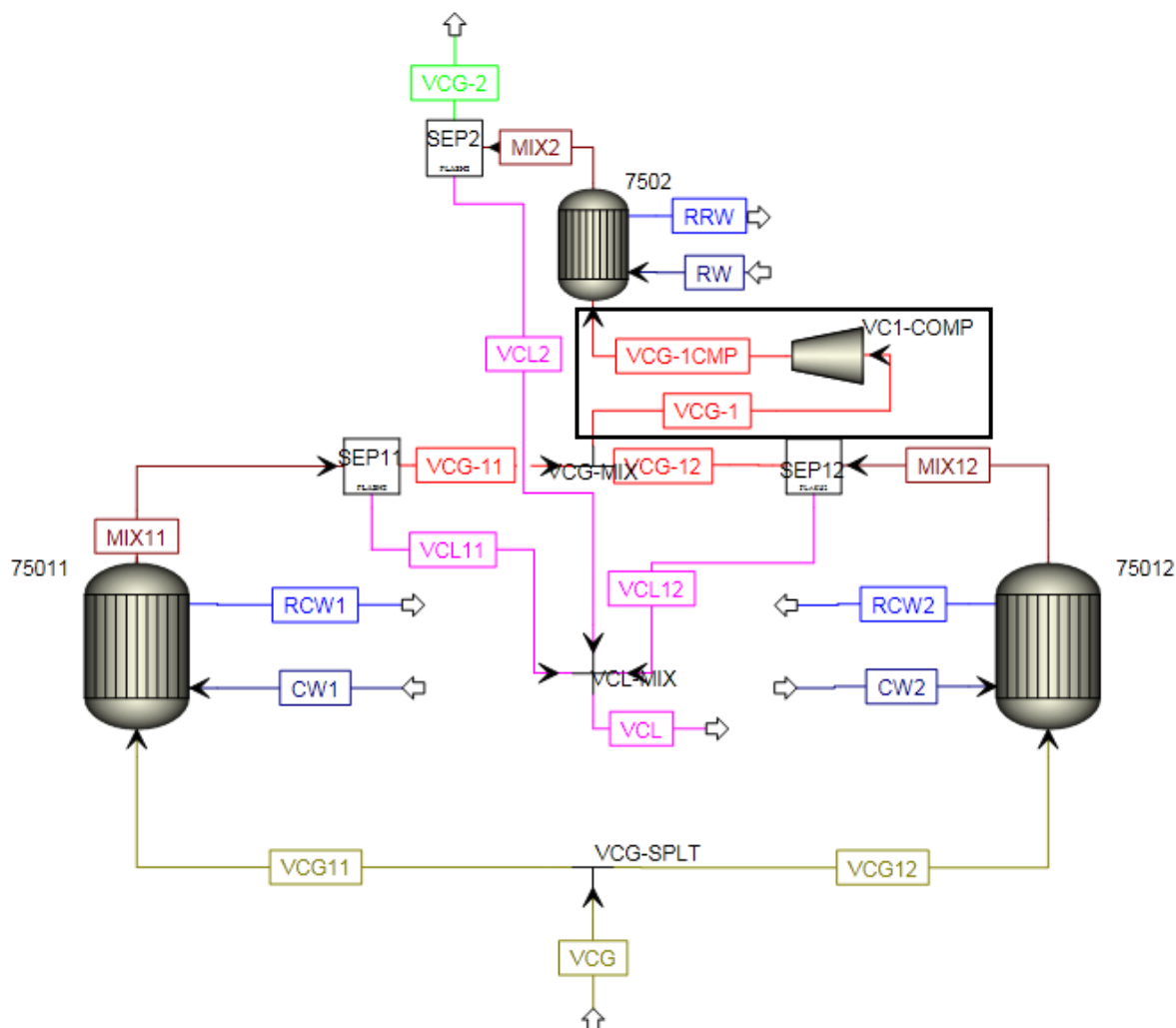


Figura 4.10. Esquema da unidade de condensação com a instalação de compressão de VCG1

O compressor escolhido é isentrópico, com a eficiência isentrópica de 75% e a eficiência mecânica de 95%. A teoria relacionada com os processos isentrópicos é descrita em mais pormenor no Apêndice G, alínea a.

O estudo de sensibilidade foi efectuado nas condições de operação de verão, sem qualquer alteração na área do primeiro estágio. A Tabela 7.10 do Apêndice F apresenta os resultados obtidos.

A representação gráfica da evolução da composição da corrente VCG2 em VCM e do caudal total de VCG2 em função da pressão da corrente VCG1 encontra-se representada no gráfico da Figura 4.11.

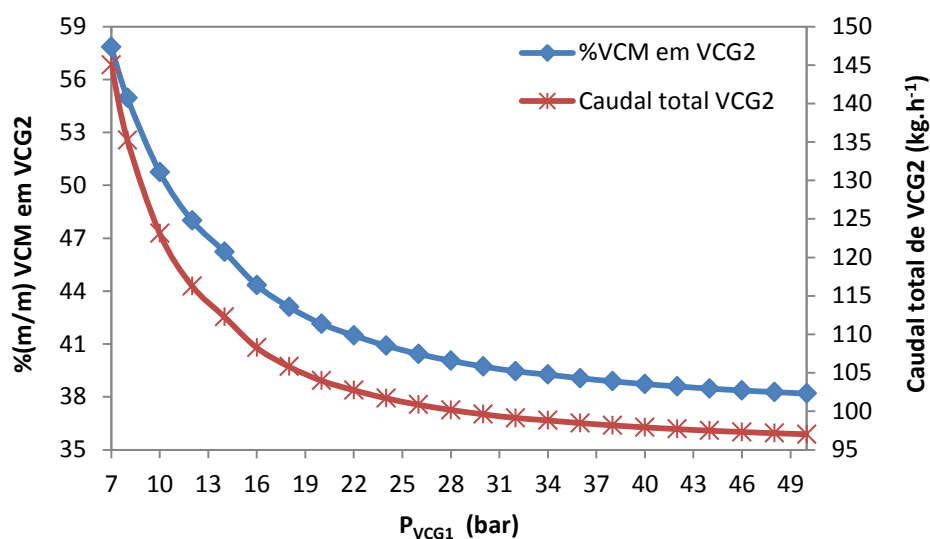


Figura 4.11. Efeito da compressão de VCG1 sobre a condensação no 2º estágio

A partir do gráfico da Figura 4.11 é possível concluir que o aumento da pressão na corrente VCG1 promove significativamente a condensação no 2º estágio, até que a partir de, aproximadamente, 30 a 50bar a %VCM na corrente VCG2 só diminui 2%(m/m). Desta forma, a partir de 30bar a %(m/m)VCM na corrente VCG2 e o caudal mássico da mesma corrente estabilizam, tendendo para uma assintota.

4.4.1.5 Alteração do fluido de refrigeração do 2º estágio

Outra alternativa proposta para melhorar o desempenho da instalação de condensação é de substituir o fluido de refrigeração do 2º estágio. Actualmente, o 2º estágio opera com a RW à temperatura constante de 8°C. A alternativa é de operar com um fluido de arrefecimento com uma temperatura inferior, por exemplo a solução aquosa de etileno-glicol (EG), muito usada na indústria. Esta solução aquosa seria arrefecida numa máquina de refrigeração ou *chiller*, usando a terminologia industrial. A introdução teórica à construção e funcionamento deste equipamento industrial encontra-se no Apêndice G, alínea b.

Para efeitos de simulação usou-se a solução aquosa com 10%(m/m) de EG. O caudal usado foi o usado actualmente da RW, 11000 $kg \cdot h^{-1}$, e 5 bar de pressão. Neste estudo, manteve-se o primeiro estágio a operar nas condições de verão, estudando-se assim a influência da alteração da temperatura do fluido de refrigeração para o pior cenário de condensação. A Tabela 7.11 do Apêndice F apresenta os resultados do estudo efectuado. Esses mesmos resultados estão representados no gráfico da Figura 4.12.

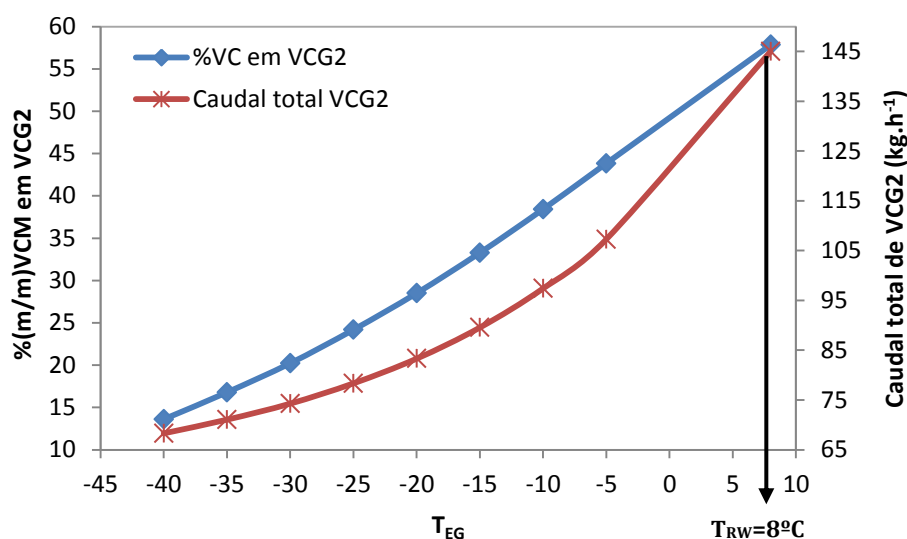


Figura 4.12. Efeito da temperatura da solução de EG sobre a condensação no 2º estágio

Os resultados da simulação representados no gráfico da Figura 4.12, demonstram explicitamente que a utilização de temperaturas mais frias no fluido de refrigeração no 2º estágio de condensação, permitem condensar maior quantidade de VCM.

A título de exemplo, operando com a solução aquosa EG a -40°C conseguir-se-ia diminuir a $\%(m/m)\text{VCM}$, na corrente de saída da unidade de condensação, de $57,8\%(m/m)$ (no verão) para cerca de $14\%(m/m)$, recuperando assim mais $43,8\%(m/m)\text{VCM}$.

4.4.1.6 Combinação do aumento de pressão com a substituição do fluido de refrigeração no 2º estágio

Visto que tanto a compressão da corrente VCG1 como a alteração do fluido de refrigeração promovem significativamente a condensação de VCM, decidiu-se combinar estes dois casos e estudar o efeito que ambos produziram no processo de condensação. Assim, efectuaram-se estudos de sensibilidade para a condição de operação actual, 7bar, e de seguida para as seguintes pressões de VCG1 à saída da unidade de compressão: 10, 20, 30, 40 e 50bar. Para cada uma das pressões em estudo fez-se variar a temperatura do fluido de refrigeração, começando com a temperatura actual, RW a 8°C , e de seguida aplicando temperaturas cada vez mais baixas da solução aquosa de EG. Resultados obtidos encontram-se na Tabela 7.12.

O cálculo das potências de compressão e refrigeração é explicado em detalhe no Apêndice G. Por sua vez, o cálculo dos custos anuais de operação de compressor e do *chiller* é explicitado em Apêndice H.

O gráfico da Figura 4.13 representa os resultados referentes a variação da composição da corrente VCG2 em VCM em função da pressão da corrente VCG1 e temperatura do fluido de refrigeração do segundo estágio.

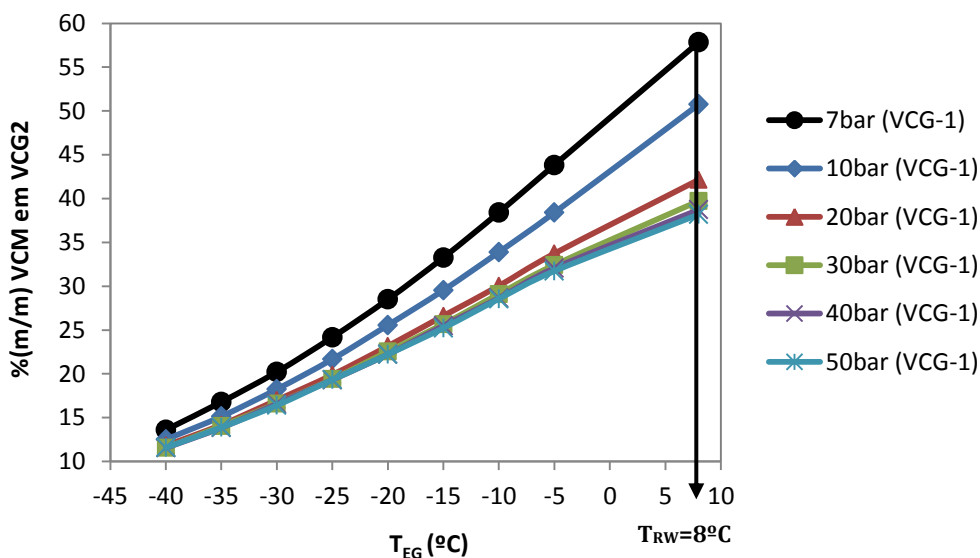


Figura 4.13. Efeito da compressão de VCG1 e refrigeração sobre a condensação no 2º estágio

A curva referente a 7bar descreve o caso em que só se altera o fluido de refrigeração. É de referir que o aumento de pressão na corrente VCG1 produz maior efeito com a T_{EG} mais alta e, com a diminuição da T_{EG} , o aumento da pressão de VCG1 deixa de ter tanta influencia sobre a condensação.

A título de exemplo, a operação com a solução de EG a -40°C e 7bar faz condensar quase a mesma quantidade de VCM que a operação com a solução de EG a -40°C e 50bar, variando a %(m/m) de VCM na corrente VCG2 em apenas 2-3%(m/m). Conclui-se que para solução aquosa de EG a -40°C o efeito de compressão é irrelevante e, por esta razão, para a utilidade com uma temperatura mais baixa a compressão da corrente VCG1 não é necessária.

Além disso, nas condições de operação com a RW a 8°C , o aumento da pressão praticamente deixa de ter qualquer efeito sobre a condensação a partir de 30bar.

Os gráficos da Figura 4.14 e Figura 4.15 representam a relação da percentagem mássica de VCM na corrente VCG2 com as potências de compressão e refrigeração, e o custo anual de compressão e refrigeração, respectivamente. Os valores representados nos gráficos são os da Tabela 7.12 do Apêndice F.

As curvas azuis dos gráficos da Figura 4.14 e Figura 4.15, referentes as potências e custos de compressão, foram geradas para o caso em que não há alteração do fluido de refrigeração do 2º estágio. De forma similar, as curvas vermelhas, referentes as potências e custos de refrigeração, foram geradas para o caso em que a corrente VCG1 está a 7bar, isto é, não há compressão da mesma. A razão disto são as conclusões tiradas do estudo representado graficamente na Figura 4.13 em que se viu que a alteração simultânea da temperatura do fluido de refrigeração e da compressão da corrente VCG1 leva à condensação de praticamente da mesma quantidade de VCM que o fluido de refrigeração a baixas temperaturas sozinho. Considerando estes resultados, concluiu-se que a aplicação conjunta destas duas alternativas não é interessante e optou-se por comparar a aplicação de cada uma das alternativas em separado.

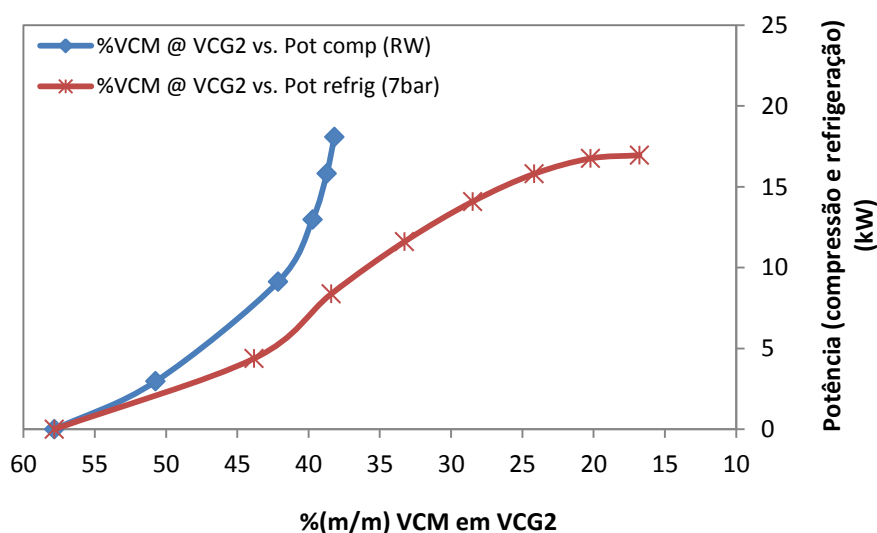


Figura 4.14. Potências de compressão/refrigeração versus %(m/m)VCM em VCG2

Do gráfico da Figura 4.14 pode-se concluir que a condensação de VCM aumenta com o aumento das potências de compressão e refrigeração, tendendo para uma assíntota vertical e horizontal no caso da compressão e refrigeração, respectivamente. Observa-se ainda que, enquanto a assíntota de compressão ocorre aos, aproximadamente, 40%(m/m)VCM na corrente VCG2, a assíntota horizontal ocorre aos, aproximadamente, 20%(m/m)VCM. Desta forma, os resultados do estudo permitem concluir que, para mesmas potências, a %(m/m)VCM na corrente VCG2 seria menor com a aplicação do fluido de refrigeração.

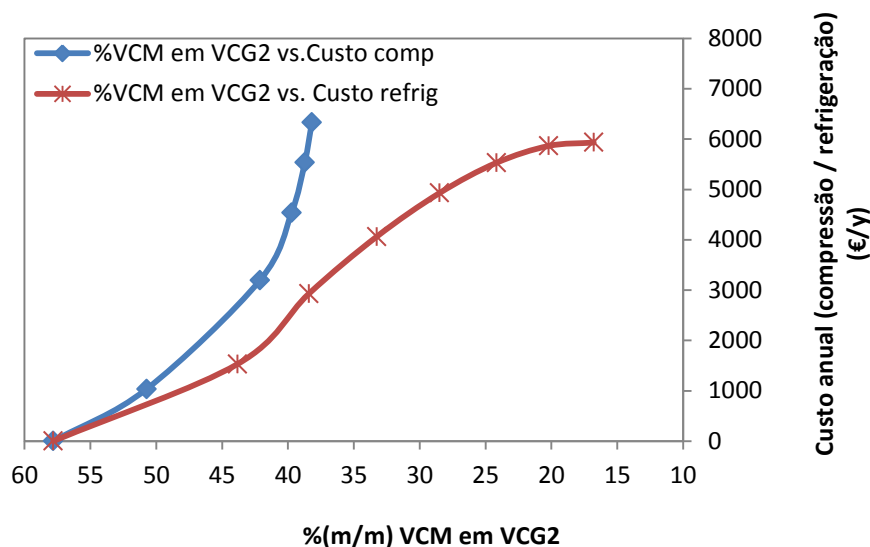


Figura 4.15. Custos anuais de operação compressão/refrigeração versus %(m/m)VCM em VCG2

A Figura 4.15 apresenta os resultados da variação da %(m/m)VCM em função dos custos anuais de operação correspondentes a cada uma das potências de compressão e refrigeração patentes na Figura 4.14. Considerando a representação gráfica dos resultados no gráfico da Figura 4.15, conclui-se que para o mesmo custo de operação anual consegue-se maior condensação com a utilização do fluido de refrigeração.

Levando em consideração todos os resultados obtidos, decidiu-se que a alteração do fluido de refrigeração do 2º estágio é uma alternativa mais interessante, e ao mesmo tempo mais económica, para o problema de optimização da instalação de condensação. Além disso, a temperatura óptima da solução aquosa de EG a operar no 2º estágio é -30°C.

4.4.1.7 Aplicação da condensação criogénica no 2º estágio

Uma nova alternativa em estudo proposta para melhorar o desempenho da instalação de condensação é a aplicação da condensação criogénica com recurso ao azoto líquido. Como está patente na Figura 2.1, existe na fábrica uma unidade de condensação criogénica cujo objectivo é condensar o VCM residual presente no gasómetro secundário. Desta forma, este estudo tem como objectivo verificar a viabilidade económica da possibilidade do aproveitamento desta utilidade para o 2º estágio de condensação.

Do estudo efectuado na secção anterior concluiu-se que a temperatura óptima de operação com a solução de EG é -30°C. Consultando a Tabela 7.14 do Apêndice G identifica-se que a potência térmica necessária a permutar, para a temperatura do fluido

de refrigeração de -30°C , é $35,989\text{Mcal.h}^{-1}$. Assim, estudou-se o comportamento da condensação criogénica com esta a permutar $35,989\text{Mcal.h}^{-1}$ nas condições de verão. Desta forma, este estudo permite comparar o custo de operação da unidade criogénica com o custo de operação do *chiller* para a mesma capacidade de condensação.

No caso da unidade criogénica, os custos de operação prendem-se, praticamente, com o preço do azoto líquido. Por esta razão, calcular os custos de operação requer calcular o caudal mássico de azoto líquido necessário para assegurar a condensação especificada. O cálculo do caudal de azoto líquido necessário é explicitado no Apêndice H. A Tabela 4.7 apresenta os resultados obtidos.

Tabela 4.7. Comparação entre operação com etileno-glicol e unidade criogénica

Q (kcal.h ⁻¹)	%VCM em VCG2	CO_{refrig} (€.ano ⁻¹)	F_{N_2} (kg.h ⁻¹)	CO_{crio} (€.ano ⁻¹)
35989,592	20	5864,460	475,385	337.523,35

Com base no resultado de custo de operação anual obtido para a condensação criogénica especificada, presente na Tabela 4.7, e comparando este valor com o custo de operação anual do *chiller* para a produção da solução aquosa de EG a -30°C (ver Tabela 7.18 do Apêndice H), é possível concluir-se que, para as mesmas condições de operação, a solução aquosa de EG é mais económica.

4.5 Dimensionamento do condensador para o 2º estágio

Com base nos estudos efectuados concluiu-se que a alternativa que oferece maior condensação de VCM e melhor relação composição final em VCM *versus* custo de operação, é a operação com a solução aquosa de EG a -30°C . Tendo em conta que a carcaça do actual condensador do segundo estágio é construída em aço de carbono, St 37.2 (ver Tabela 7.6 do Apêndice E), e sabendo que a temperatura mínima de operação para aço de carbono é de -29°C^{28} (ver Figura 7.19 e o comentário), conclui-se que o condensador não é próprio para operar com solução de EG a -30°C .

Há necessidade de dimensionar um novo condensador, com matérias de construção próprios para estas condições. O dimensionamento do condensador foi feito em Aspen Hetran. A informação necessária a introduzir são os caudais (componentes e composições), as temperaturas de entrada e saída de ambas correntes e a potência térmica a permutar. Aspen Hetran efectua um cálculo iterativo de modo a calcular a área necessária do novo condensador.

O método de dimensionamento utilizado é o mesmo que foi usado no cálculo dos coeficientes de transferência de calor dos condensadores existentes. O método em questão é *Mass transfer film* que usa a correlação de Colburn-Hougen para misturas de vapor com gases não condensáveis.

O resultado de dimensionamento encontra-se na Tabela 4.8.

Tabela 4.8. Parte da folha de especificação técnica do condensador dimensionado

Empresa		CIRES,Lda		Serviço		Condensação VCM			
Tamanho	-----	mm	TEMA/tipo	BEM/C	Conectado	1	paralelo	1	série
Área estágio	7	m ²		Qtd.	1		Área condens	7	m ²

Desempenho de um condensador

Localização do fluido		Carcaça		Tubos	
Nome do fluido		Solução aquosa EG (32%(m/m))		VCG1	
Caudal total (in/out)	kg.h ⁻¹	11000		465,414	
vapor				392,704	16,353
líquido				0	385,204
água		7480	7480		
não condensáveis				72,710	63,859
Temperatura (in/out)	°C	-30	-26,6	33,9	-20,3
Densidade	kg.m ⁻³	1086,22	1083,05	15,96	975,68
Viscosidade	kg.(m.s) ⁻¹	7,75*10 ⁻³	6,8*10 ⁻³	1,3*10 ⁻⁵	2,7*10 ⁻⁴
Massa molecular	g.mol ⁻¹				
vapor				62,498	
não condensáveis				29,536	
Calor específico	kcal.(kg°C) ⁻¹	0,970	0,968	0,2268	0,3128
Condutividade térmica	kcal.(h.m°C) ⁻¹	0,303	0,305	0,012	0,115
Calor latente, líquido	kcal.kg ⁻¹			72,63	80,02
Pressão de entrada	barG	5		6	
Velocidade	m.s ⁻¹				
Perda de carga	bar	2,4*10 ⁻²		1,26*10 ⁻³	
Factor de sujidade	(m ² h°C).kcal ⁻¹	1,9*10 ⁻⁴		2,3*10 ⁻⁴	

Calor permutado	35,989	mcal.h ⁻¹	ΔT _{ml}	39,15	°C	F	1
Coeficiente TC	138,743	kcal.(h.m2°C) ⁻¹					

A partir dos resultados de dimensionamento de novo condensador para o 2º estágio de condensação, patentes na Tabela 4.8, conclui-se que a área de transferência de calor necessária é 7m².

5 Conclusões

O cloreto de vinilo (monómero) é a matéria-prima para a produção de PVC. A conversão reaccional média de VCM em PVC é de 80%. Considerando a conversão que se apresenta e a produção anual de PVC que a CIRES, Lda tem, $200000\text{ton.ano}^{-1}$, calcula-se que há 50000ton.ano^{-1} de VCM que passam pela instalação de recuperação.

O processo de recuperação de VCM usado na CIRES, Lda é a condensação. Esta unidade é composta por dois estágios (1º com dois condensadores e 2º com um condensador) cujos condensadores são do tipo Carcaça e feixe de Tubos. A condensação ocorre dentro dos tubos. O tipo de condensação é o *knockback reflux*, pois o filme de condensado escoia para baixo pela parede de tubo, contra o gás ascendente.

Actualmente, a corrente de saída da unidade de condensação (VCG2) possui na sua composição, em média, 55%(m/m)VCM nas condições de operação de verão. Este trabalho teve como objectivo otimizar o desempenho da unidade de condensação, diminuindo a concentração de VCM na corrente VCG2.

Realizaram-se vários estudos de sensibilidade e estudaram-se várias alternativas de diminuir a composição mássica da corrente VCG2 em VCM. Ao longo destes estudos verificou-se que o 2º estágio de condensação opera com o excesso de área nas condições de inverno, pelo que a opção de aumentar a área de transferência de calor no 2º estágio foi logo posta de parte. Verificou-se também que o aumento da área de transferência de calor no 1º estágio não produz a melhoria significativa. Ou seja, tecnicamente, com a colocação de mais um condensador no 1º estágio, igual aos já existentes, nas condições de operação de verão condensaria apenas mais 0,7%(m/m) de VCM, no 2º estágio, do que condensa na instalação actual no verão.

Estudou-se também a possibilidade de comprimir a corrente VCG1, substituir o fluido de arrefecimento do segundo estágio (RW) por uma solução aquosa de EG e a possibilidade de instalar um condensador criogénico, a operar com azoto líquido, no 2º estágio.

No caso da compressão da corrente VCG1, antes de esta entrar no segundo estágio de condensação, verificou-se que a partir de 30bar, a composição de VCG2 em VCM estabiliza, tendendo para uma assintota ($\approx 38\%$ (m/m)VCM). O valor estimado do custo de operação por cada 1kg extra de VCM condensado é $0,0091\text{€}.\text{kg}_{\text{VCM}}^{-1}$.

Para a operação com a solução aquosa de EG a -30°C , nas condições de verão, no 2º estágio, conseguir-se-ia reduzir a $\%(m/m)$ de VCM na corrente VCG2 para 20%(m/m). Isto faz com que o valor estimado do custo de operação por cada 1kg extra de VCM condensado seja $0,0068\text{€}.\text{kg}_{\text{VCM}}^{-1}$.

Por sua vez, o estudo de implementação da condensação criogénica demonstrou que o caudal de azoto líquido mínimo necessário para condensar a mesma quantidade de VCM que se consegue condensar com o EG é $475,385\text{kg}.\text{h}^{-1}$. Em consequência deste resultado, o valor estimado do custo de operação por cada 1kg extra de VCM condensado é $0,392\text{€}.\text{kg}_{\text{VCM}}^{-1}$.

Portanto, concluiu-se que a alternativa mais interessante no sentido de otimizar o desempenho da actual unidade de condensação, seria a substituição da RW a 8°C por uma solução aquosa de EG a -30°C .

No entanto, devido aos materiais que foram utilizados na construção do condensador actual do segundo estágio, é necessário investir num outro condensador cujos materiais de construção lhe permitam operar a temperatura de -30°C . Fez-se o dimensionamento desse permutador e calculou-se que a área de transferência de calor necessária é de 7m^2 .

Resumidamente, com a aplicação da solução aquosa de EG a -30°C no 2º estágio, condensar-se-ia mais $56,24\text{kg}.\text{h}^{-1}$ de VCM (38%(m/m)) do caudal total de VCG2 que sai do 2º estágio). Isto significa que, por cada hora de operação, a instalação criogénica condensaria menos 56,24kg de VCM, levando a uma poupança no caudal de azoto líquido gasto na unidade criogénica. O caudal em causa é $82,265\text{kg}.\text{h}^{-1}$, correspondendo a 411.325kg de azoto líquido por ano. Multiplicando este caudal pelo preço do azoto líquido, $142\text{€}.\text{ton}^{-1}$, resulta que poupar-se-ia $58.408,15\text{€}.\text{ano}^{-1}$.

O valor da poupança deve ser levado em conta no estudo económico como o valor limite para a viabilidade económica do projecto de aquisição da unidade de refrigeração com a solução aquosa de EG e no cálculo do tempo de retorno do investimento associado.

6 Bibliografia

1. Tomás, A. Polimerização de Cloreto de Vinilo em fase dispersa: Desenvolvimento e Caracterização de novos produtos e Optimização do Processo. Coimbra, Coimbra, 2009.
2. Marten, F. L., Semicrystalline Polymers to Ziegler-Natta Catalysts. In *Encyclopedia of Polymer Science and Technology*, 3rd ed.; Kroschwitz, J. I., Ed. John Wiley & Sons, Inc.: Hoboken, New Jersey, 2003; Vol. 8, pp 437-475.
3. Burgess, R. H., Suspension Polymerisation Of Vinyl Chloride. In *Manufacture and Processing Of PVC*, Burgess, R. H., Ed. Applied Science Publishers Ltd: London, 1982; pp 1-26.
4. Cowfer, J. A., Vinyl Chloride Monomer. In *PVC Handbook*, Charles E. Wilkes, J. W. S., Charles Daniels, Ed. Hanser Gardner Publications, Inc.: Cincinnati, Ohio, 2005; pp 1-21.
5. Donald E. Witenhafer, D. J. P., Polymerization. In *PVC Handbook*, Charles E. Wilkes, J. W. S., Charles Daniels, Ed. Hanser Gardner Publications, Inc.: Cincinnati, Ohio, 2005; pp 57-64, 80-83.
6. Summers, J. W., Introduction: Chemistry and Physical Structure. In *PVC Handbook*, Charles E. Wilkes, J. W. S., Charles Daniels, Ed. Hanser Gardner Publications, Inc.: Cincinnati, Ohio, 2005; pp 1-6.
7. Y. Saeki, T. E., Technical progresses for PVC production. *Progress in Polymer Science* **2002**, 27, 2055-2131.
8. Clark, M., Particle Formation. In *Particulate Nature Of PVC. Formation, Structure and Processing*, Butters, G., Ed. Applied Science Publishers Ltd: London, 1982; pp 1-48.
9. Sarvetnick, H. A., Polymerization Processes. In *Polyvinil Chloride*, Reinhold Plastics Applications: New York, 1969; pp 37-48.
10. Alsopp M., V. G., Vinyl Chloride Polymers. In *Encyclopedia of Polymer Science and Technology*, 3rd ed.; Mark, H. F., Ed. John Wiley & Sons: New Jersey, USA, 2003; Vol. 8, pp 437-476.
11. Evans, D. E. M., The Manufacture Of PVC Paste and Emulsion Polymers. In *Manufacture And Processing Of PVC*, Burgess, R. H., Ed. Applied Science Publishers Ltd: London, 1982; pp 63-66.
12. Europa, C. d., Relativa à aproximação das disposições legislativas, regulamentares e administrativas dos Estados-Membros respeitantes à protecção sanitária dos trabalhadores expostos ao cloreto de vinilo monómero. In *Directiva n.º 78/610/CEE*, Conselho da Europa.
13. Social, M. d. e. e. d. S., Aprova o regime de protecção da saúde dos trabalhadores contra os riscos da exposição ao cloreto de vinilo monómero nos locais de trabalho. In *Decreto-Lei 273/89*, Ministério do emprego e da Segurança Social.

14. Manufacturers, E. C. o. V. EVCM Industry Charter for the Production of VCM and PVC. <http://www.pvc.org/Sustainability/Industry-Responsible-care/Vinyl-Chloride-Monomer-VCM/European-Council-of-Vinyl-Manufacturers-ECVM-Charters> (15/12),
15. Ernst U. Schlünder, V. G., *Heat Exchanger Design Handbook*. Hemisphere Publishing Corporation: 1983.
16. J. R. Backhurst, J. H. H., *Fluid Flow, Heat Transfer and Mass Transfer*. 6th ed.; Butterworth-Heinemann: Oxford, 1999; Vol. 1, p 381-566.
17. Kern, D. Q., Condensation of single vapors & Condensation of mixed vapors. In *Process Heat Trasfer*, Kern, D. Q., Ed. McGraw-Hill International Editions: 1950; pp 252-374.
18. Marto, P. J., Condensation. In *Handbook of Heat Transfer*, 3rd ed.; Warren M. Rohsenow, J. P. H., Young I. Cho, Ed. McGraw-Hill: New York, 1998.
19. John H. Lienhard IV, J. H. L. V., Heat Exchanger Design. In *A Heat Tranfer Textbook*, 4th ed.; Phlogiston Press: Cambridge, Massachusetts, 2011; pp 103-120.
20. Sinnott, R. K., *An Introduction to Chemical Engineering Design*. 3rd ed.; Butterworth-Heinemann: Oxford, 2003; Vol. 6, p 634-725.
21. Ludwig, E. E., Heat Transfer. In *Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants*, 3rd ed.; Gulf Professional Publishing: 2001; Vol. 3.
22. Klaus D. Timmerhaus, M. S. P., Heat-Transfer Equipment - Design and Costs. In *Plant Design and Economics for Chamical Engineers*, 4th ed.; McGraw-Hill, Inc.: Singapore, 1991; pp 579-643.
23. Serth, R. W., The Delaware Method. In *Process Heat Transfer Principles and Applications*, Elsevier Science & Technology Book: 2001; pp 245-268.
24. Benyahia, F., Flowsheeting Packages: Reliable or Fictitious Process Models? *ICHEME* **2000**, 78, 840-844.
25. Aspen Technology, I., Hetran correlation options. In *Aspen HTSF+ User Guide*, Aspen Technology, Inc.: Cambridge, Massachusetts, 2003.
26. Taborek, J., Shell and Tube heat exchangers: Single-phase flow. In *Heat Exchanger Design Handbook*, Ernst U. Schlünder, V. G., Ed. Hemisphere Publishing Corporation: 1983; pp 984-1059.
27. Thome, J. R., Single-Phase Shell-Side Flows and Heat Transfer. In *Engineering Data Book*, Wolverine Tube, Inc.: 2010; Vol. 3.
28. Institute, A. P., Fitness-For-Service. In *API 579-1/ASME FFS-1*, API & ASME: 2007, Second Edition.

A. Método de Bell: cálculo do coeficiente de transferência de calor do lado da carcaça (sem mudança de fase)

Este apêndice contém o exemplo do cálculo do coeficiente de transferência de calor do fluido da carcaça para a temperatura de entrada no condensador de 25°C, as representações esquemáticas do interior da carcaça de um permutador do tipo Carcaça e feixe de Tubos com chicanas segmentadas e figuras com os gráficos necessários para a determinação dos factores correctivos do coeficiente de transferência de calor local.

Tabela 7.1. Propriedades da água (@28°C)

Substância	μ (Ns.m ⁻²)	ρ (kg.m ⁻³)	C_p (J.kg ⁻¹ °C ⁻¹)	k (W.m ⁻¹ °C ⁻¹)
Água	8,33×10 ⁻⁴	996,377	4182,277	0,612

A seguir apresenta-se o exemplo do cálculo de coeficiente de transferência de calor de filme do fluido da carcaça para o condensador do 1º estágio. Todos os dados geométricos da carcaça, chicana e tubos, usados, encontram-se na Tabela 4.3 e Tabela 4.4.

a) Coeficiente para fluxo cruzado ideal (h_{oc})

$$A_s = \frac{[(P_t - d_o)D_c l_b]}{P_t} = 4,94 \times 10^{-2} \text{ (m}^2\text{)}$$

$$G_s = \frac{F_{CW}}{3600} \times \frac{1}{A_s} = 3,54 \times 10^2 \text{ (kg/m}^2\text{s)}$$

$$Re = \frac{G_s d_o}{\mu} = 1,3515 \times 10^4$$

$$Pr = \frac{C_p k}{\mu} = 5,69$$

Com o valor do número Re , tira-se o valor de j_h do gráfico da Figura 7.3 deste apêndice. Procede-se ao cálculo do coeficiente de transferência de calor de filme para o fluxo cruzado ideal (h_{oc}) pela Eq. 3.2. O resultado é 3296,824 W/(m²°C).

b) Factor correctivo da linha de tubos (F_n)

$$P'_t = 0,87 P_t = 3,31 \times 10^{-2} \text{ (m)}$$

$$N_{cv} = \frac{D_b - 2H_c}{P'_t} = 18,40$$

O valor do F_n tira-se do gráfico da Figura 7.4, em função de N_{cv} . O resultado é 1,025.

c) Factor de correcção da janela (F_w)

$$H_b = (D_c - 0,852) - \left[\frac{(D_c - D_b)}{2} \right] = 0,206 \times 10^{-1} \text{ (m)}$$

$$C_b = \frac{H_b}{D_b} = 20,20 \text{ (\%)}$$

Da Figura 7.8 tira-se o valor de R'_a correspondente à C_b de 20,2%. O valor em questão é 0,135.

$$N_w = N_t \times R'_a = 78,3$$

$$R_w = \frac{2 \times N_w}{N_t} = 0,27$$

Da Figura 7.5 determina-se que para R_w igual a 0,27 o valor do factor correctivo da janela (F_w) é, aproximadamente, 1,08.

d) Factor de correcção para o by-pass (F_b)

$$A_b = l_b(D_c - D_b) = 2,10 \times 10^{-2} \text{ (m}^2\text{)}$$

$$A_b/A_s = 4,25 \times 10^{-1}$$

O valor do factor correctivo F_b tira-se do gráfico da Figura 7.6, onde este é representado em função do quociente A_b/A_s . O resultado é 0,585.

e) Factor de correcção para fugas (F_L)

$$A_{tb} = \frac{c_t}{2} \pi d_o (N_t - N_w) = 2,00 \times 10^{-2} \text{ (m}^2\text{)}$$

$$A_{sb} = \frac{c_s D_c}{2} (2\pi - \theta_b) = 3,84 \times 10^{-3} \text{ (m}^2\text{)}$$

c_t é a folga diametral entre o tubo e a chicana, tipicamente de 0,8mm. O valor de c_s , folga diametral entre carcaça e chicana, pode ser consultado na Tabela 7.2 deste apêndice. O

valor usado neste cálculo foi 1,6mm. O valor de θ_b tira-se da Figura 7.8 deste apêndice em função do corte da chicana,, em percentagem, especificado na Tabela 4.3.

$$A_L = A_{tb} + A_{sb} = 2,39 \times 10^{-2} \text{ (m}^2\text{)}$$

$$A_L/A_s = 4,83 \times 10^{-1}$$

Com o quociente A_L/A_s tira-se o valor correspondente de β_L da Figura 7.7. β_L é 0,32. Calcula-se o valor do factor correctivo F_L pela Eq. 3.5. O resultado é 0,63.

f) Coeficiente de transferência de calor de filme (h_s)

Uma vez calculados o coeficiente de transferência de calor para o fluxo cruzado ideal e todos os factores correctivos necessários, procede-se, por fim, ao cálculo do coeficiente de transferência de calor de filme do lado da carcaça pela Eq. 3.1. O resultado obtido para h_s é $1,342 \times 10^3 \text{ W/(m}^2\text{°C)}$.

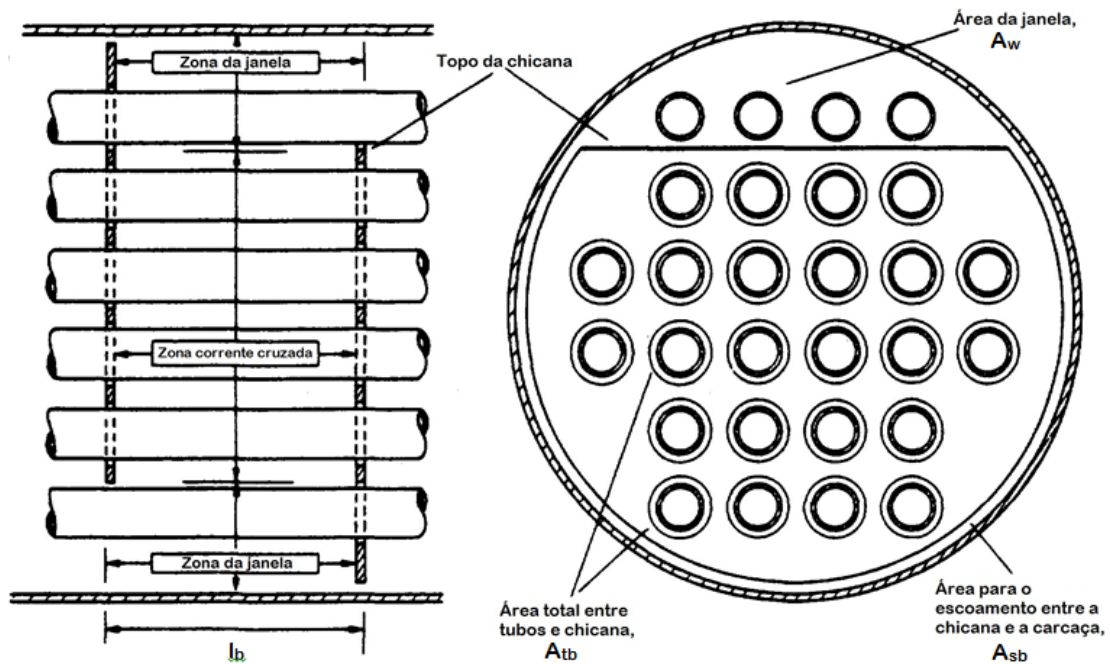


Figura 7.1. Representação das zonas de escoamento espaços para fugas dentro da carcaça^{16, 20}

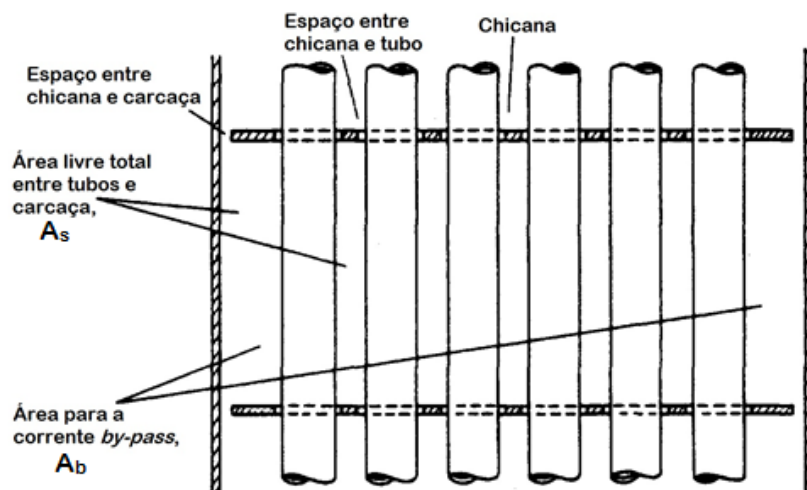


Figura 7.2. Representação esquemática de áreas livres para fugas na carcaça do permutador de calor^{16, 20}

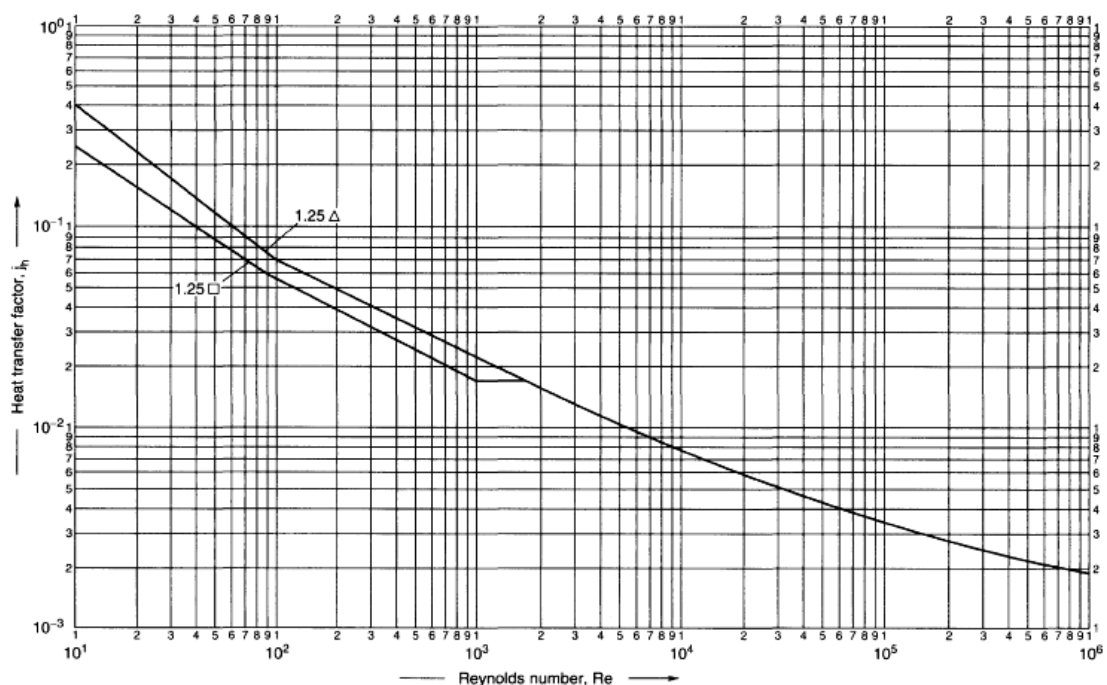


Figura 7.3. Factor de transferência de calor para escoamento cruzado através do feixe de tubos²⁰

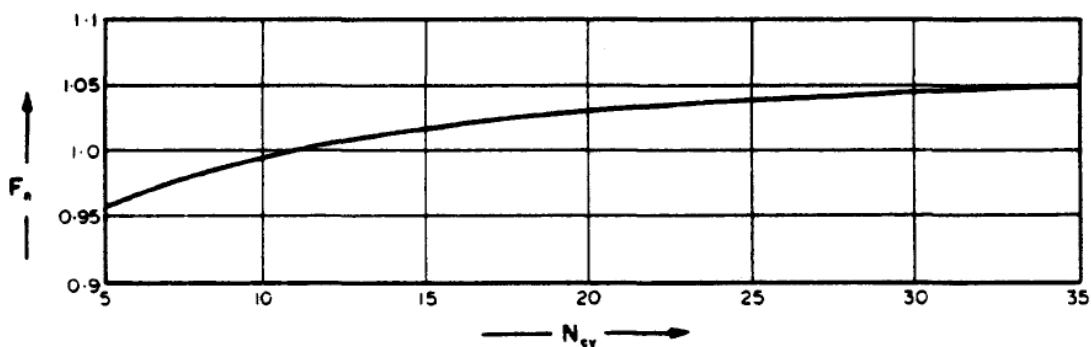


Figura 7.4. Factor correctivo (F_n)²⁰

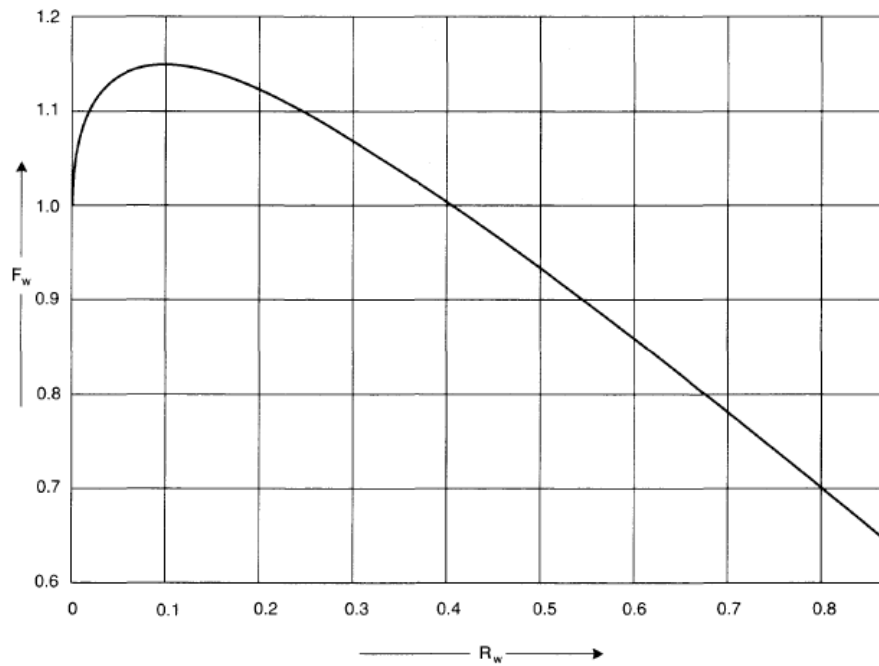


Figura 7.5. Factor correctivo para a janela da chicana (F_w)²⁰

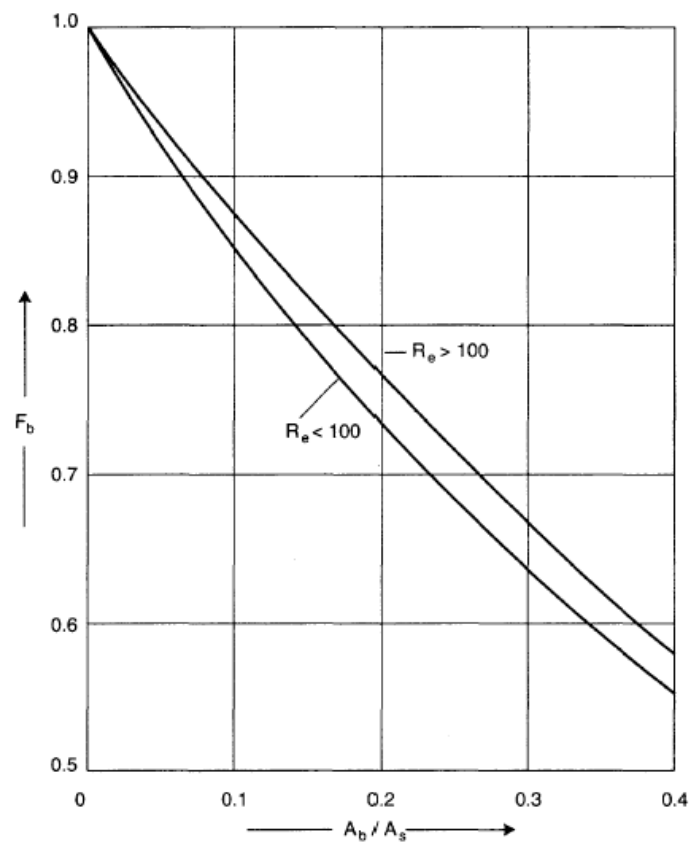


Figura 7.6. Factor correctivo para a corrente *by-pass* (F_b)²⁰

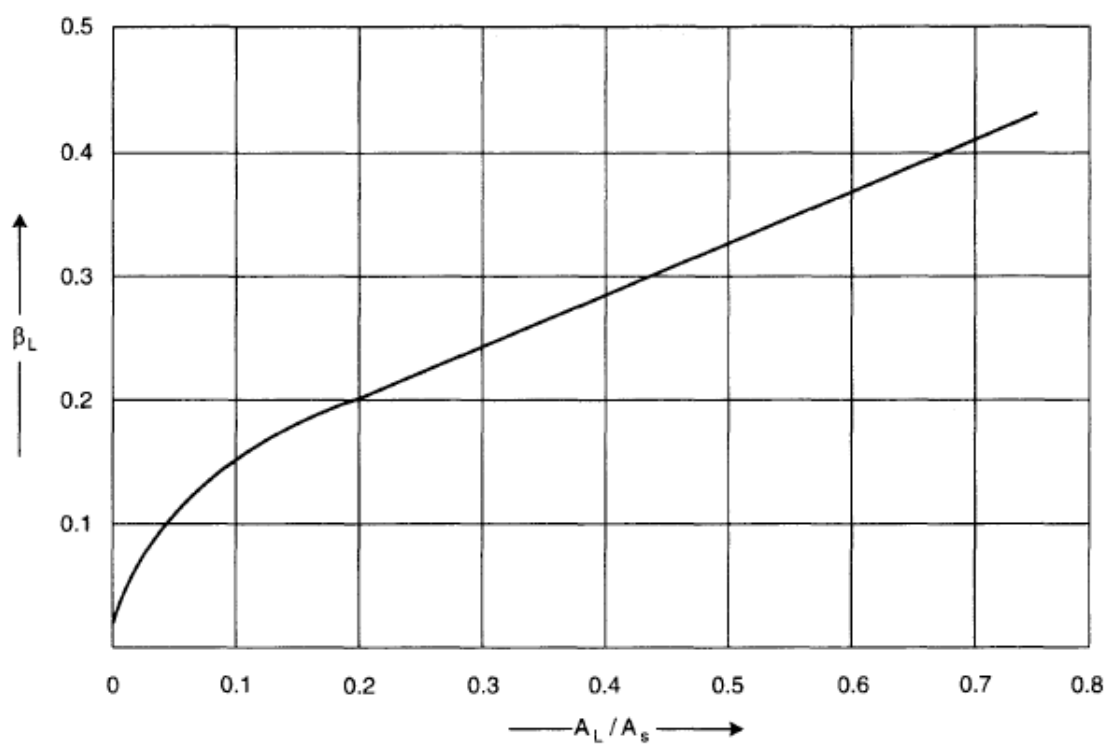


Figura 7.7. Factor correctivo $(F_L)^{20}$

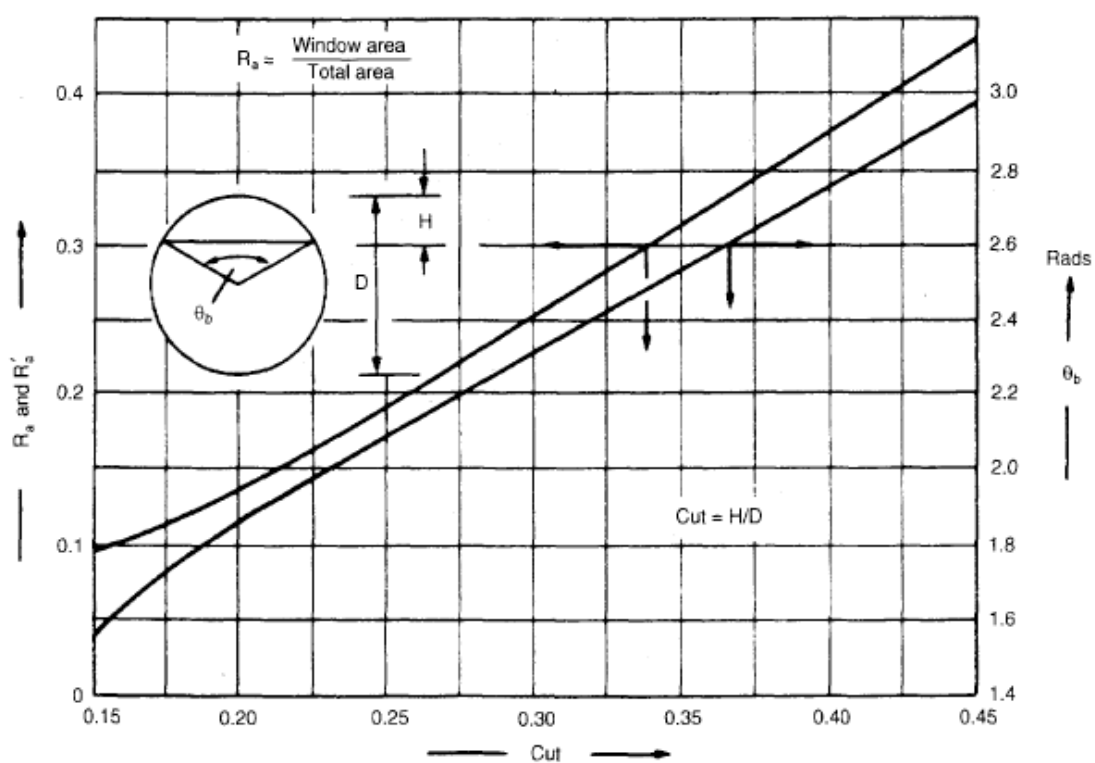


Figura 7.8. Factores geométricos da chicana²⁰

Tabela 7.2. Tamanhos *standart* das folgas entre carcaça e chicana^{16, 20}

Shell diameter, D_s	Baffle diameter	Tolerance
Pipe shells		
6 to 25 in. (152 to 635 mm)	$D_s - \frac{1}{16}$ in. (1.6 mm)	$+\frac{1}{32}$ in. (0.8 mm)
Plate shells		
6 to 25 in. (152 to 635 mm)	$D_s - \frac{1}{8}$ in. (3.2 mm)	$+0, -\frac{1}{32}$ in. (0.8 mm)
27 to 42 in. (686 to 1067 mm)	$D_s - \frac{3}{16}$ in. (4.8 mm)	$+0, -\frac{1}{16}$ in. (1.6 mm)

B. Método de Nusselt: cálculo do coeficiente de transferência de calor do lado de tubo (com mudança de fase)

Este apêndice apresenta o exemplo de cálculo do coeficiente de filme de transferência de calor do lado de tubos para o condensador do primeiro estágio nas condições de operação de verão ($T_{CW}=25^{\circ}\text{C}$). As propriedades do gás de VCM e do condensado, necessárias para o cálculo do respectivo coeficiente de transferência de calor, encontram-se na Tabela 7.3. As propriedades do gás de VCM correspondem à temperatura média do gás nos tubos (41°C), entre a entrada e a saída do condensador, enquanto as propriedades do condensado correspondem à temperatura média entre a temperatura do gás de VCM e parede do tubo (36°C).

Tabela 7.3. Propriedades do vapor de VCM e do condensado

	ρ (kg.m^{-3})	μ ($\text{kg.m}^{-1}\text{s}^{-1}$)	k ($\text{W.m}^{-1}\text{C}^{-1}$)	λ (kcal.kg^{-1})
Condensado	882,51	$1,58 \times 10^{-4}$	0,11	69,23
Vapor	17,6	-----	-----	

a) Cálculo do caudal total de condensado (W_c)

Para calcular a potência térmica permutada, faz-se um balanço à água de arrefecimento.

$$Q = F_{CW} C_{p_{CW}} \Delta T_{CW} = 330044,46 \text{ (kcal/h)}$$

$$W_c = \frac{Q}{\lambda} = 4767,293 \text{ (kg/h)}$$

b) Cálculo do caudal de condensado por unidade de perímetro de tubo (Γ)

Considerando que o VCM que condensa no 2º estágio, antes de entrar no tanque de armazenamento, passa dentro de tubos dos condensadores do 1º estágio, o caudal total de condensado que passa nos tubos do 1º estágio é a soma calculado na alínea a) com o que condensa no 2º estágio. Assim, o caudal W_c total é $4921,429 \text{ kg.h}^{-1}$.

$$\Gamma = \frac{W_c}{N_t \pi d_i} = 0,025 \text{ (kg/(m s))}$$

c) Cálculo do coeficiente de filme de transferência de calor (\bar{h}) e Re

$$\bar{h} = 0,926 k_L \sqrt[3]{\frac{\rho_L(\rho_L - \rho_v)g}{\mu_L \Gamma}} = 1257,669 \text{ (W/m}^2\text{°C)}$$

$$Re = \frac{4\Gamma}{\mu_L} = 638,826$$

d) Cálculo do coeficiente de filme de transferência de calor corrigido (\bar{h}_c)

Uma vez que o número de Reynolds é superior a 30, é necessário corrigir o valor de coeficiente de filme de transferência de calor, de forma a contabilizar as ondulações existentes que, por sua vez, fazem aumentar os respectivos coeficientes de filme.

$$\frac{\bar{h}_c}{\bar{h}} = 0,87 Re_c^{0,07} = 1719,739 \text{ (W/m}^2\text{°C)}$$

C. Descrição de simulação em *Aspen Plus*

Aspen Plus®, aplicativo de AspenONE 2006.5, é um *software* comercial que permite simular grande variedade de processos de indústria química e os respectivos equipamentos. Este apêndice explica, em linhas gerais, os passos principais da simulação em Aspen Plus®. Todas as imagens apresentadas a seguir são do simulador Aspen Plus®, versão 2006.5.

Na janela principal do simulador aparece o espaço para a criação da *flowsheet* do processo pretendido, com a biblioteca de equipamentos a aparecer por baixo desse espaço, em forma de uma barra de ferramentas (ver Figura 7.9).

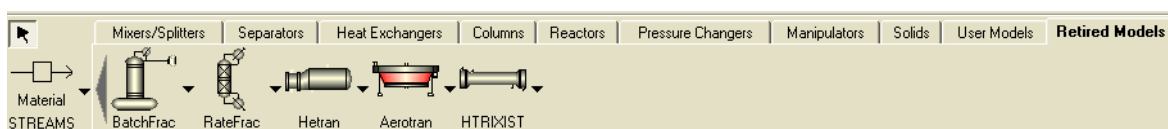


Figura 7.9. Barra de equipamentos do Aspen Plus

O primeiro passo de qualquer simulação é definir os componentes intervenientes no processo. Para isso é necessário abrir a *Data Browser* (botão com imagem de óculos) e especificar os componentes dos fluidos do processo no separador *Components*. (ver Figura 7.10).

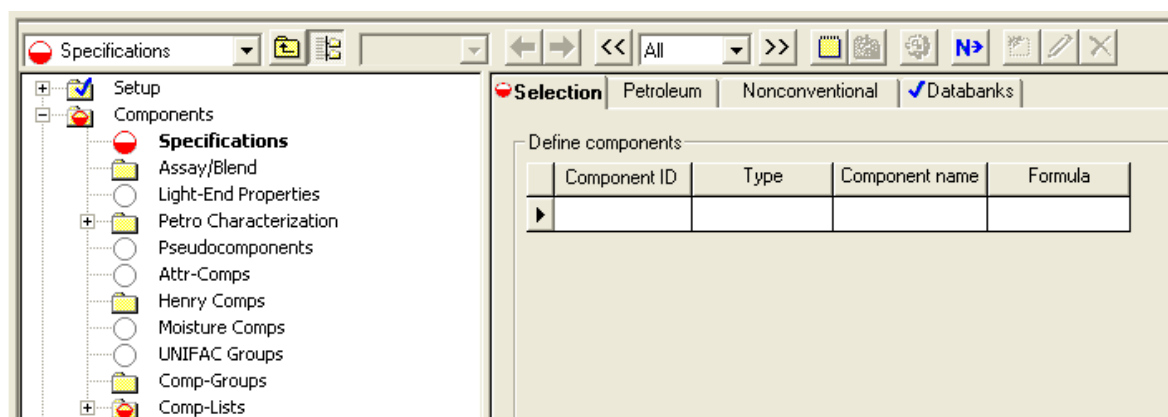


Figura 7.10. Especificação dos componentes dos fluidos intervenientes no processo

Uma vez especificados todos os componentes químicos, procede-se à escolha do modelo termodinâmico para o cálculo dos equilíbrios entre componentes dos fluidos em questão e as suas propriedades físicas e termodinâmicas. Para isso, clica-se em *Specifications* do menu *Properties*, escolhe-se o tipo do processo e o respectivo modelo termodinâmico (ver Figura 7.11).

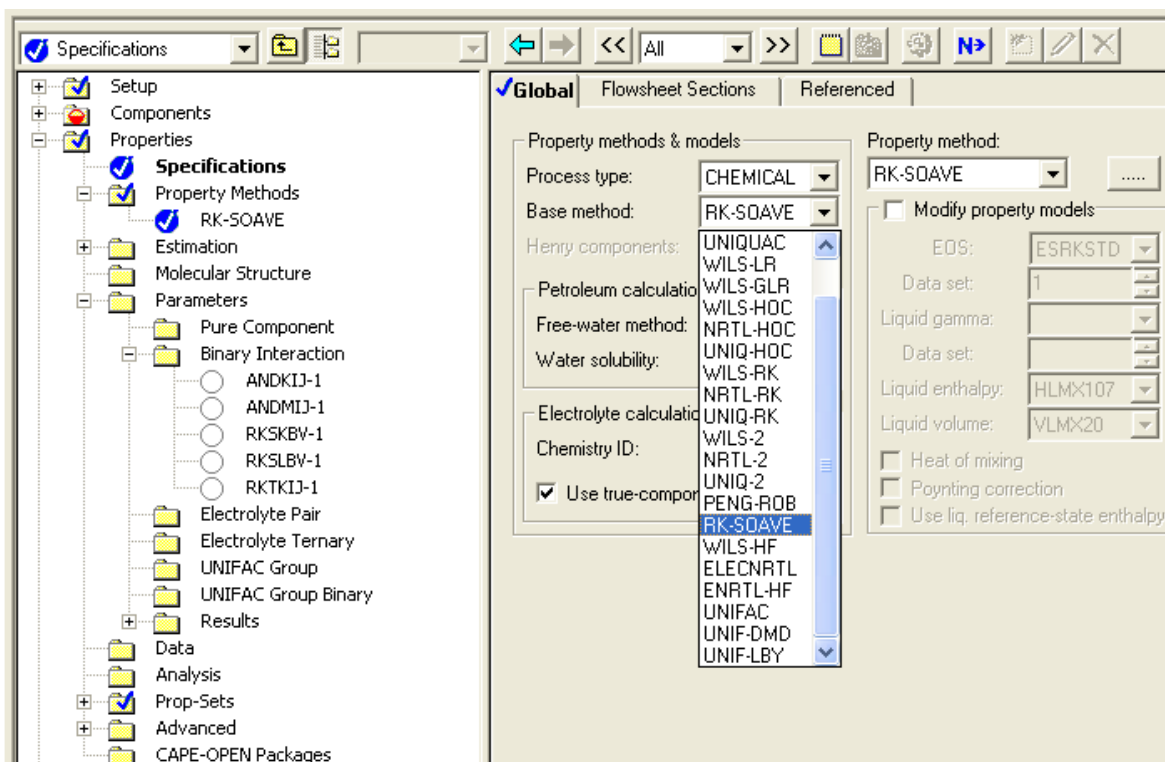


Figura 7.11. Escolha do modelo termodinâmico da simulação

O modelo termodinâmico escolhido para descrever a mistura gasosa VCG é RK-Soave. A razão de sua escolha e a descrição mais detalhada deste modelo encontram-se no Apêndice D. Depois de se ter escolhido o modelo termodinâmico, é necessário activar os parâmetros de interacção binários, disponíveis para os componentes da mistura. Isto consegue-se clicando no separador *Binary Interactions* do menu *Parameters* (ver Figura 7.11). Quando se especifica qual o modelo termodinâmico a ser usado, ficam definidos, automaticamente, os métodos de cálculo das propriedades físicas e termodinâmicas dos fluidos. Estes métodos definidos por *default* podem ser alterados, clicando no nome do modelo, debaixo do separador *Property Methods* (ver Figura 7.11).

O próximo passo na simulação é escolher o equipamento pretendido. Para isso, acede-se a barra de equipamentos (ver Figura 7.9) e escolhe-se o tipo de equipamento industrial pretendido. No âmbito do projecto desenvolvido, escolheu-se *Retired Models – Hetran*. Para fins de simulação escolheu-se a ferramenta *Hetran* porque foi desenvolvida especificamente para a simulação e dimensionamento dos permutadores de calor do tipo Carcaça e feixe de Tubos. Depois de selecção do equipamento, este coloca-se na janela da *flowsheet* e dá-se o nome ao equipamento. Para configurar o permutador de calor é necessário aceder ao menu do equipamento através da *Data Browser*. No menu do permutador de calor (ver Figura 7.12) pode-se escolher o tipo de cálculo que se quer

efectuar: dimensionamento/*design* (selecção de geometria), avaliação/*rating* (averiguar se a unidade está sub- ou sobredimensionada) e simulação/*simulation* (determinação das condições de saída).

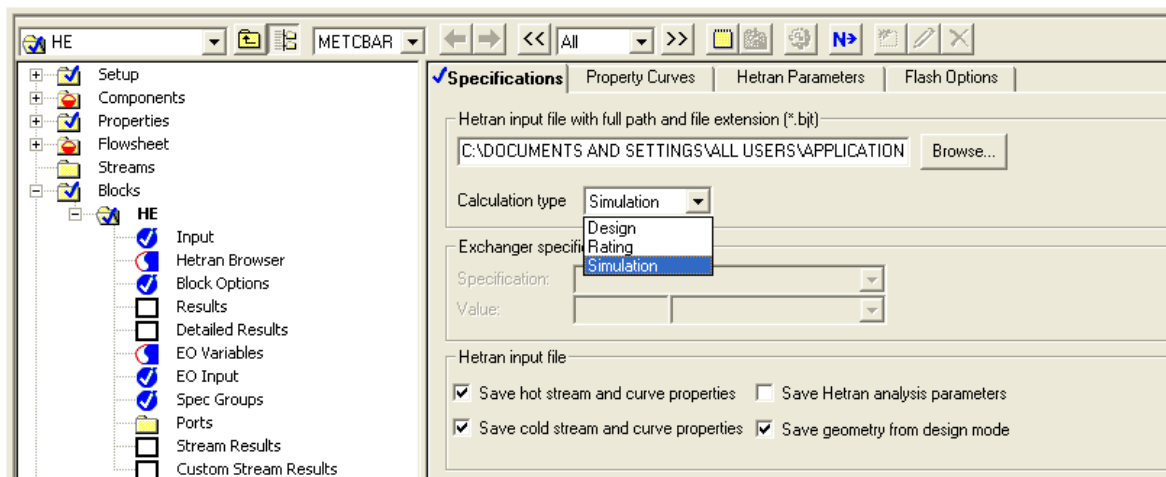


Figura 7.12. Especificação do permutador de calor

É de salientar que o programa cria, por *default*, o ficheiro (*.bjt) *Hetran*, onde se encontra armazenada toda a informação sobre a geometria e o desenho térmico do permutador de calor, e guarda esse ficheiro na área de trabalho do simulador definida durante a instalação do programa. O ficheiro em questão pode ser criado pela pessoa que simula o processo. No entanto, neste caso, é preciso ter em atenção que o ficheiro *.bjt e os ficheiros da simulação devem estar na mesma pasta, caso contrário a simulação não funciona.

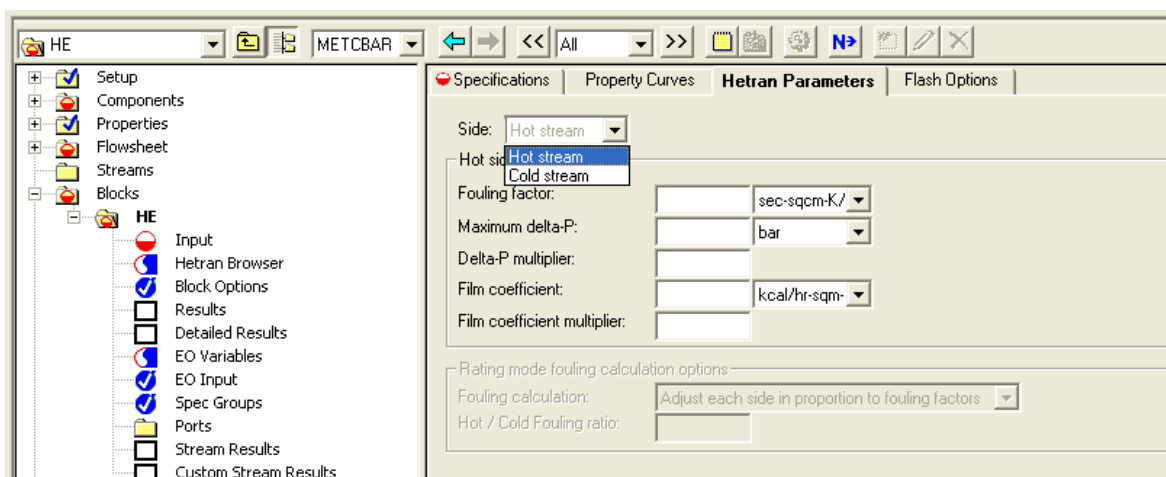


Figura 7.13. Parâmetros do permutador de calor

A Figura 7.13 apresenta a janela de especificação dos parâmetros do permutador de calor. Aqui especificam-se os factores de sujidade, perda de carga e coeficientes de filme

para a corrente quente e fria. A ferramenta *Hetran* tem a capacidade de calcular os coeficientes de filme para cada uma das correntes. Esta característica é especialmente útil nos processos de condensação de uma mistura de gases, visto que os coeficientes do filme nestes casos variam com a temperatura (a condensação de uma mistura de gases não ocorre isotermicamente) e a composição da mistura gasosa.

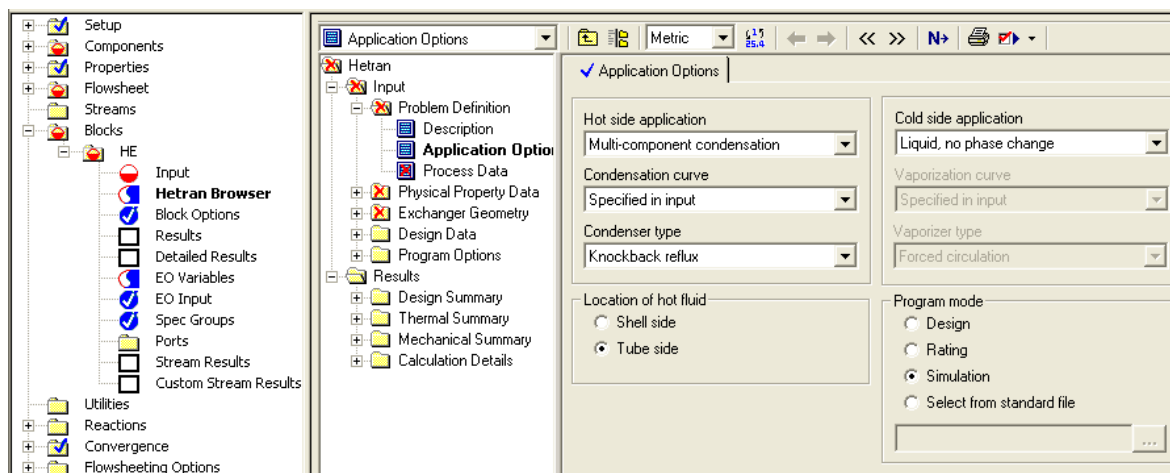


Figura 7.14. Hetran Browser

Tendo-se colocado o equipamento na *flowsheet*, procede-se a escolha do tipo de processo clicando em *Hetran Browser* e a seguir em *Application Options* na nova janela (ver Figura 7.14). No âmbito deste projecto escolheu-se a condensação multi-componente no condensador do tipo *knockback reflux* nos tubos para a corrente quente, e a operação sem mudança de fase para a corrente fria. A geometria do permutador (tipo do permutador de calor, geometria dos tubos, chicanas, espelho de tubos, etc. introduz-se no separador *Exchanger Geometry* (ver Figura 7.15).

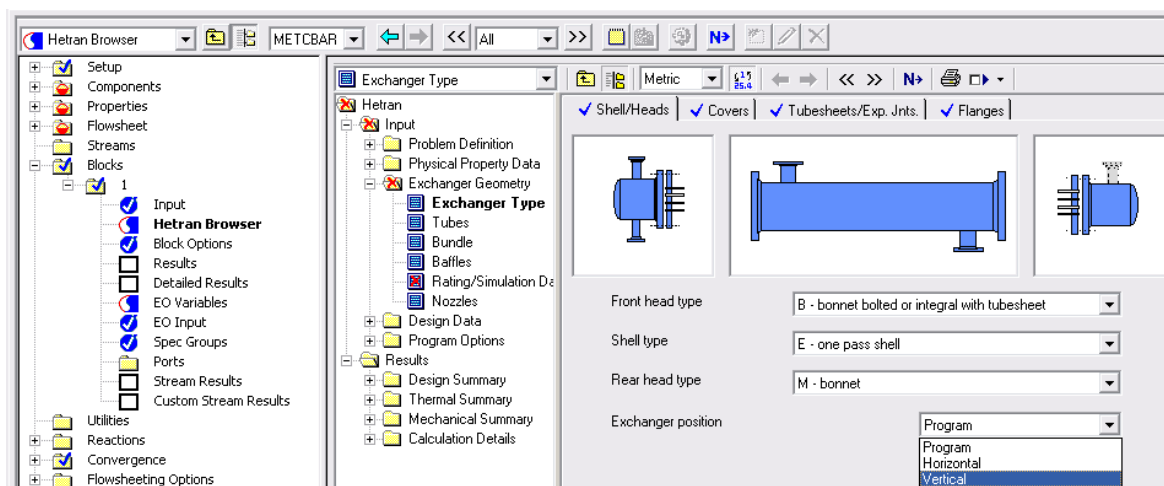


Figura 7.15. Especificação da geometria do equipamento

O importante passo da simulação ou dimensionamento dos permutadores de calor é especificar as correlações a serem usadas no cálculo dos coeficientes de transferência de calor e perdas de carga (ver Figura 7.16)

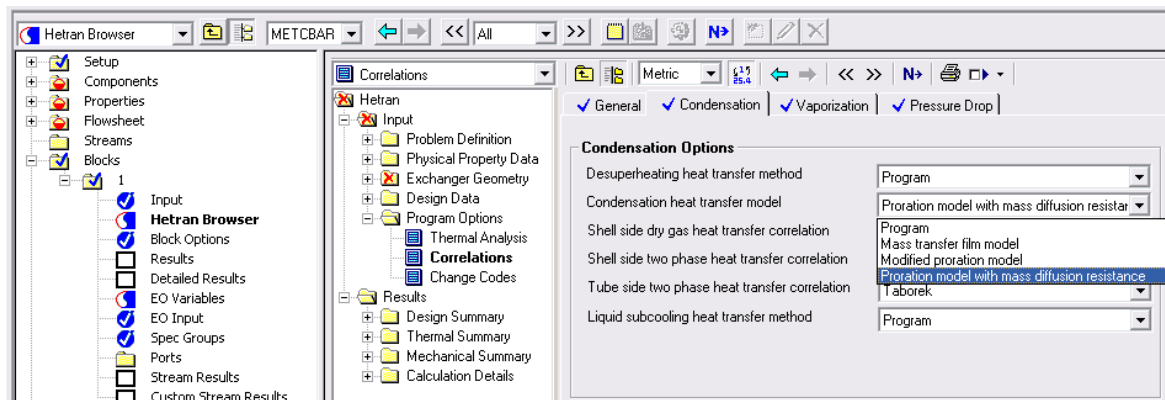


Figura 7.16. Especificação do método de cálculo dos coeficientes de transferência de calor

D. EOS Redlich-Kwong-Soave²⁹

O uso da equação de estado de Redlich-Kwong-Soave é recomendado para os processos de processamento de gases, refinarias e aplicações petroquímicas. Este método termodinâmico é aconselhável para misturas não polares ou ligeiramente polares, tais como hidrocarbonetos e gases leves (dióxido de carbono, sulfeto de hidrogénio, etc). Este método é particularmente bom para os processos de alta pressão e temperatura, tais como o processamento de hidrocarbonetos ou extracções supercríticas. Visto que a condensação de VCM é, no fundo, o processamento de uma mistura de gases na qual existe pequena quantidade de gases leves, N_2 e O_2 , escolheu-se este método para o cálculo das propriedades dessa mistura de gases.

A equação de estado Redlich-Kwong-Soave surgiu em 1972, quando Soave introduziu uma importante modificação na equação de estado de Redlich-Kwong (1949). Em 1955, Pitzer introduziu o conceito de factor acêntrico, ω . O factor acêntrico é a medida da configuração e esfericidade das moléculas. Este também pode ser visto como a medida da deformação das moléculas.

A equação de Redlich-Kwong introduziu a dependência do parâmetro de atracção da equação de Van der Waals, “ a ”, da temperatura. O parâmetro “ b ” não foi modificado pois representa o volume das moléculas. O que o Soave fez foi expandir a dependência do parâmetro “ a ”, propondo a dependência deste parâmetro de duas variáveis, a temperatura e factor acêntrico:

$$a = a(T, \omega) \quad \text{Eq. 7.1}$$

Esta foi a primeira vez que o parâmetro “ a ” foi expresso não apenas como a função de temperatura, mas também como a função da forma (esfericidade) das moléculas, através do factor acêntrico do Pitzer.

A equação de estado Redlich-Kwong-Soave é, então, dada pela seguinte expressão²⁹:

$$\left(P + \frac{\alpha a}{\tilde{v}(\tilde{v} + b)} \right) (\tilde{v} - b) = RT \quad \text{Eq. 7.2}$$

Esta equação também pode ser explicitada para a pressão:

$$P = \frac{RT}{\tilde{v} - b} - \frac{\alpha a}{\tilde{v}(\tilde{v} + b)} \quad \text{Eq. 7.3}$$

onde os factores “ α ”, “ a ”, “ b ” são dados por²⁹:

$$\alpha = \left[1 + (0,48508 + 1,55171\omega - 0,1561\omega^2)(1 - \sqrt{T_r}) \right]^2 \quad \text{Eq. 7.4}$$

$$a = 0,427480 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \quad \text{Eq. 7.5}$$

$$b = 0,086640 \frac{RT_c}{P_c} \quad \text{Eq. 7.6}$$

É interessante notar que a expressão do “ α ” vale 1 ao longo da isotérmica crítica. Isto é, quando $T_r = 1$. As expressões de “ a ” e “ b ” obtêm-se por aplicação das propriedades críticas (ver Tabela 7.4) na Eq. 7.3.

Tabela 7.4. Propriedades críticas do VCM, CM, CE, azoto e oxigénio³⁰

Propriedade	VCM	CM	CE	N_2	O_2
T_c (K)	425	416,3	460,4	126,2	154,6
P_c (bar)	51,5	67,0	52,7	33,9	50,4

Para misturas, Soave propôs uma modificação para as regras de mistura que usam os parâmetros de interacção binária k_{ij} :

$$(\alpha a)_m = \sum_i \sum_j y_i y_j (\alpha a)_{ij} \quad \text{Eq. 7.7}$$

$$(\alpha a)_{ij} = \sqrt{(\alpha a)_i (\alpha a)_j (1 - k_{ij})} \quad \text{Eq. 7.8}$$

$$b_m = \sum_i y_i b_i \quad \text{Eq. 7.9}$$

Os parâmetros de interacção binária são factores que servem para ajustar as equações de estado e fazê-las corresponder aos dados experimentais das misturas. Assim, pode-se dizer que estes parâmetros são uma medida de interacção entre pares de moléculas distintas. Os valores de k_{ij} são constantes e são usados quando dois componentes são parte de uma mistura multicomponente mais complexa. O valor de k_{ij} utilizado no *Aspen Plus®* para as interacções entre N_2 e O_2 é -0,0078 para o intervalo de temperaturas de -273,15°C à 726,85°C.

E. Folhas de especificações técnicas dos condensadores

Tabela 7.5. Folha de especificação técnica do condensador do 1º estágio

Empresa		CIRES,Lda			Serviço		Condensação VCM		
Tamanho	3040	mm	TEMA/tipo	BEM/C	Conectado	2	paralelo	1	série
Área estágio	195,8	m ²		Qtd.	2		Área condens	97,9	m ²

Desempenho de um condensador

Localização do fluido		Carcaça		Tubos	
Nome do fluido		CW		VCG	
Caudal total (in/out)	kg.h ⁻¹	63000		5000	
vapor				4963,645	196,352
líquido				0	4767,293
água		63000	63000		
não condensáveis				36,355	36,355
Temperatura (in/out)	°C	25	29,9	48	33,9
Densidade	kg.m ⁻³	993,86	989,05	18,13	886
Viscosidade	kg.(m.s) ⁻¹	9,13*10 ⁻⁴	8,20*10 ⁻⁴	1,2*10 ⁻⁵	1,6*10 ⁻⁴
Massa molecular	g.mol ⁻¹				
vapor				62,498	
não condensáveis				29,536	
Calor específico	kcal.(kg°C) ⁻¹	1,155	1,154	0,2322	0,3576
Condutividade térmica	kcal.(h.m°C) ⁻¹	0,522	0,528	0,012	0,097
Calor latente, líquido	kcal.kg ⁻¹			71	71,54
Pressão de entrada	barG	5		6	
Velocidade	m.s ⁻¹				
Perda de carga	bar	2,4*10 ⁻²		1,8*10 ⁻⁴	
Factor de sujidade	(m ² h°C).kcal ⁻¹	1,9*10 ⁻⁴		2,3*10 ⁻⁴	
Calor permutado	361,962	mcal.h ⁻¹	ΔT _{ml}	14,54	°C F 1
Coeficiente TC	288,073	kcal.(h.m ² °C) ⁻¹			

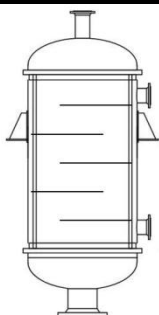
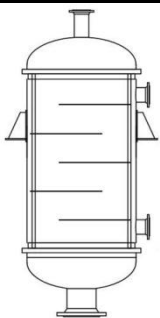
Construção do Equipamento								Esquema		
				Carcaça		Tubos				
Pressão (dim./teste)		barG		5,5		10				
Temperatura (dim.)		°C		60		100				
Nº de passagens				1		1				
Corrosão permitida		mm		1,5		0				
Tamanho de conexões		mm								
entrada				300		150				
saída				150		150				
Nº tubos	580	OD	31,8	mm	Esp.	2	mm	Comprimento	1800	mm
Pitch	37,9	mm	Tipo tubo	Plano				Material	WN 1.4462	
Carcaça	ID	1100	mm	OD	1124	mm	Material	St 37.2		
Chicanas		Tipo	Single segmental			%corte	23	Espaçamento:		
								centro-centro	282,5	mm
								entrada	277,5	mm

Tabela 7.6. Folha de especificação técnica do condensador do 2º estágio

Empresa		CIRES,Lda		Serviço		Condensação VCM				
Tamanho	2350	mm	TEMA/tipo	BEM/C	Conectado	1	paralelo	1	série	
Área estágio	34,7	m²		Qtd.	1		Área condens	34,7	m²	
Desempenho de um condensador										
Localização do fluido			Carcaça				Tubos			
Nome do fluido			RW				VCG1			
Caudal total (in/out)		kg.h ⁻¹	11000				465,414			
vapor							392,704	85,323		
líquido							0	308,273		
água			11000	11000						
não condensáveis							72,710	71,818		
Temperatura (in/out)		°C	8	10	33,9		11,2			
Densidade		kg.m ⁻³	1010,11	1008,21	15,96		924,79			
Viscosidade		kg.(m.s) ⁻¹	1,371*10 ⁻³	1,302*10 ⁻³	1,3*10 ⁻⁵		1,94*10 ⁻⁴			
Massa molecular		g.mol ⁻¹								
vapor							62,498			
não condensáveis							29,536			
Calor específico		kcal.(kg°C) ⁻¹	1,1591	1,1584	0,2268		0,3358			
Condutividade térmica		kcal.(h.m°C) ⁻¹	0,5	0,503	0,012		0,105			
Calor latente, líquido		kcal.kg ⁻¹					72,63	75,61		
Pressão de entrada		barG	5				6			
Velocidade		m.s ⁻¹								
Perda de carga		bar	2,52*10 ⁻²				1,26*10 ⁻³			
Factor de sujidade		(m²h°C).kcal ⁻¹	1,9*10 ⁻⁴				2,3*10 ⁻⁴			
Calor permutado		25,570	mcals.h ⁻¹	ΔT _{ml}		11,24	°C	F	1	
Coeficiente TC		99,313	kcal.(h.m2°C) ⁻¹							
Construção do Equipamento						Esquema				
			Carcaça		Tubos					
Pressão (dim./teste)		barG	5,5		10					
Temperatura (dim.)		°C	60		100					
Nº de passagens			1		1					
Corrosão permitida		mm	1,5		0					
Tamanho de conexões		mm								
entrada			200		100					
saída			80		100					
Nº tubos	280	OD	31,8	mm	Esp.	2	mm	Comprimento	1800	mm
Pitch	37,9	mm	Tipo tubo	Plano			Material		WN 1.4462	
Carcaça	ID	750	mm	OD	770	mm	Material		St 37.2	
Chicanas		Tipo	Single segmental		%corte	22	Espaçamento:			
							centro-centro		193	mm
							entrada		193	mm

F. Tabelas com resultados dos estudos de sensibilidade

Tabela 7.7. Desempenho da instalação de condensação ao longo do ano

T_{cw} (°C)	% VCM em VCG1	F_{VCG1} (kg.h ⁻¹)	% VCM em VCG2	F_{VCG2} (kg.h ⁻¹)	η (%)
25	85,297	453,276	57,831	145,003	99,141
24	84,181	411,859	57,519	142,042	99,163
23	83,057	376,387	57,292	139,433	99,181
22	82,012	347,869	57,047	136,942	99,199
21	80,846	320,207	56,900	134,643	99,215
20	79,626	295,064	56,699	132,148	99,232
19	78,543	275,452	56,581	130,176	99,245
18	77,421	257,341	56,417	128,053	99,260
17	76,268	240,734	56,330	126,168	99,272
16	75,197	226,865	56,218	124,368	99,283
15	74,096	213,954	56,134	122,648	99,294
14	72,877	201,031	56,054	120,830	99,306
13	71,849	191,106	55,996	119,358	99,315
12	70,591	180,022	55,917	117,576	99,326
11	69,538	171,533	55,859	116,139	99,335
10	68,245	161,988	55,789	114,425	99,346

Os dados preenchidos a cinzento mais escuro referem-se aos casos em que o 2º estágio de condensação opera com o excesso de área de transferência de calor.

η é a eficiência global do processo de condensação e foi definida como o quociente entre o caudal de VCM que condensa em ambos estágios e o caudal total de VCM que entra na instalação de condensação:

$$\eta = \frac{F_{VCM\text{condensado}}}{F_{VCM\text{total}}} = \frac{\left(\frac{\%VCM_{VCG}}{100} \times F_{VCG}\right) - \left(\frac{\%VCM_{VCG2}}{100} \times F_{VCG2}\right)}{\frac{\%VCM_{VCG}}{100} \times F_{VCG}} \quad \text{Eq.7.10}$$

Tabela 7.8. Efeito da variação da área de transferência de calor do 2º estágio sobre a condensação no 2º estágio

A (m ²)	%VCM em VCG2	F_{VCG2} (kg.h ⁻¹)
34,9	55,994	132,321
44,9	55,763	131,596
54,9	55,701	131,403
64,9	55,686	131,354
74,9	55,682	131,342
84,9	55,682	131,341
94,9	55,682	131,342
97,9	55,682	131,342

Tabela 7.9. Efeito da variação da área de transferência de calor do 1º estágio de condensação

A (m ²)	%VCM em VCG1	F_{VCG1} (kg.h ⁻¹)	%VCM em VCG2	F_{VCG2} (kg.h ⁻¹)
97,9	83,749	386,392	55,993	132,320
107,9	82,679	355,166	55,694	129,718
117,9	81,860	334,085	55,508	127,900
127,9	81,229	319,269	55,386	126,586
137,9	80,740	308,539	55,302	125,614
147,9	80,359	300,587	55,242	124,874

A área que aparece na tabela em cima não é a área total do primeiro estágio, mas sim a área de cada um dos condensadores.

Tabela 7.10. Efeito da compressão da corrente VCG1 sobre a condensação no 2º estágio

P_{VCG1} (bar)	%VCM em VCG2	F_{VCG2} (kg.h ⁻¹)	T_{VCG1} (°C)	W_{comp} (kW)
7	57,831	145,003	33,852	0,000
8	54,949	135,238	43,974	1,089
10	50,740	123,106	61,102	2,956
12	47,992	116,281	75,304	4,524
14	46,226	112,275	87,467	5,880
16	44,324	108,254	98,125	7,076
18	43,092	105,798	107,625	8,148
20	42,141	103,976	116,206	9,119
22	41,477	102,738	124,039	10,009
24	40,900	101,688	131,250	10,829
26	40,434	100,854	137,937	11,592
28	40,048	100,174	144,175	12,303
30	39,724	99,610	150,023	12,972
32	39,450	99,138	155,531	13,601
34	39,261	98,815	160,738	14,197
36	39,057	98,469	165,677	14,762
38	38,881	98,171	170,377	15,300
40	38,727	97,913	174,860	15,813
42	38,592	97,688	179,146	16,304
44	38,470	97,484	183,254	16,775
46	38,364	97,309	187,199	17,227
48	38,271	97,155	190,993	17,662
50	38,187	97,017	194,648	18,082

Os dados da Tabela 7.10 preenchidos a cinzento mais escuro referem-se aos casos em que o segundo estágio de condensação opera com excesso de área de transferência de calor.

Tabela 7.11. Efeito da utilização da solução de etileno-glicol sobre a condensação no 2º estágio

T_{EG} (°C)	%VCM em VCG2	F_{VCG2} (kg.h ⁻¹)	T_{REG} (°C)	T_{VCG2} (°C)
-5	43,830	107,255	-1,8494	-0,5566
-10	38,413	97,389	-6,6980	-5,4042
-15	33,267	89,541	-11,5619	-10,2925
-20	28,496	83,298	-16,4393	-15,1734
-25	24,179	78,338	-21,3281	-19,9962
-30	20,218	74,266	-26,2233	-24,8988
-35	16,784	71,049	-31,1276	-29,6750
-40	13,608	68,297	-36,0324	-34,7206

Tabela 7.12. Resultados para o estudo do efeito da compressão de VCG1 e refrigeração no 2º estágio em simultâneo

P_{VCG1} (bar)	T_{CW} (°C)	%VCM em VCG2	F_{VCG2} (kg.h ⁻¹)	W_{comp} (kW)	CO_{comp} (€.ano ⁻¹)	W_{refrig} (kW)	CO_{refrig} (€.ano ⁻¹)
7	8	57,831	145,003	N.A.	N.A.	0	0
	-5	43,831	107,256			4,376	1531,460
	-10	38,413	97,389			8,372	2930,060
	-15	33,267	89,541			11,608	4062,660
	-20	28,496	83,298			14,084	4929,260
	-25	24,179	78,338			15,800	5529,860
	-30	20,218	74,266			16,756	5864,460
	-35	16,784	71,049			16,952	5933,060
	-40	13,608	68,297			16,388	5735,660
10	8	50,740	123,106	2,956	1034,427	N.A.	N.A.
	-5	38,395	97,359				
	-10	33,889	90,423				
	-15	29,538	84,588				
	-20	25,553	79,853				
	-25	21,672	75,713				
	-30	18,244	72,383				
	-35	15,138	69,599				
	-40	12,505	67,387				
20	8	42,141	103,976	9,119	3191,772	N.A.	N.A.
	-5	33,729	90,194				
	-10	30,037	85,218				
	-15	26,617	81,066				
	-20	23,162	77,253				
	-25	19,889	73,946				
	-30	17,001	71,245				
	-35	14,190	68,787				
	-40	11,798	66,815				
30	8	39,724	99,610	12,972	4540,034	N.A.	N.A.
	-5	32,419	88,366				
	-10	29,102	84,043				

P_{VCG1} (bar)	T_{CW} (°C)	%VCM em VCG2	F_{VCG2} (kg.h ⁻¹)	W_{comp} (kW)	CO_{comp} (€.ano ⁻¹)	W_{refrig} (kW)	CO_{refrig} (€.ano ⁻¹)
	-15	25,675	79,991				
	-20	22,553	76,616				
	-25	19,399	73,474				
	-30	16,618	70,900				
	-35	14,049	68,668				
	-40	11,555	66,619				
40	8	38,727	97,913				
	-5	32,057	87,873				
	-10	28,638	83,471				
	-15	25,480	79,772				
	-20	22,227	76,280	15,813	5534,600	N.A.	N.A.
	-25	19,314	73,393				
	-30	16,572	70,859				
	-35	13,855	68,504				
	-40	11,546	66,612				
50	8	38,187	97,017				
	-5	31,728	87,429				
	-10	28,554	83,368				
	-15	25,233	79,495				
	-20	22,214	76,266	18,082	6328,611	N.A.	N.A.
	-25	19,324	73,403				
	-30	16,407	70,712				
	-35	13,885	68,530				
	-40	11,580	66,639				

G. Cálculo das potências de compressão e refrigeração

a) Cálculo das potências de compressor

Um processo isentrópico é o processo em que não ocorre a variação de entropia do sistema. Por esta razão, o trabalho de um compressor isentrópico é o trabalho mínimo necessário para comprimir a corrente até uma dada pressão de saída. A potência isentrópica (potência mínima) de um compressor pode ser calculada através da primeira lei de termodinâmica, e é definida como o produto do caudal da corrente que se quer comprimir com a variação de entalpia total da mesma corrente. A expressão matemática correspondente é:

$$W_i = \frac{(F \times \Delta H)}{\eta_m} = \frac{[F \times (H_{out} - H_{in})]}{\eta_m} \quad \text{Eq.7.11}$$

onde, W_i é a potência isentrópica necessária para a compressão, F é o caudal mássico, ΔH é a variação de entalpia por unidade de massa, que é igual a diferença entre H_{out} (entalpia da corrente à saída do compressor) e H_{in} (entalpia da corrente à entrada do compressor), e η_m é a eficiência mecânica do compressor.

No entanto, tendo em conta que a eficiência isentrópica típica é de 75%, a potência real necessária é a potência isentrópica corrigida para a eficiência isentrópica especificada. Assim, a potência real do compressor é calculado pela seguinte equação:

$$W = \frac{W_i}{\eta_s} \quad \text{Eq.7.12}$$

onde, W é a potência real necessária do compressor e η_s é a eficiência isentrópica do compressor.

As entalpias foram calculadas para a gama das pressões de compressão estudada, com o auxílio de *Aspen Properties*®. Tendo em conta que as condições térmicas da corrente a entrada do compressor são às de saída do primeiro estágio de condensação, as condições de entrada referem-se ao pior cenário de condensação, condições de verão com a CW a 25°C, pois é nesta altura que se tem maior caudal de VCG1 para comprimir e, por conseguinte, requer-se maior potência de compressão. É por esta razão que o compressor é dimensionado para as condições de operação de verão. Os resultados encontram-se na Tabela 7.13.

Tabela 7.13. Resultados de dimensionamento do compressor

F_{VCG1} (kg.h ⁻¹)	T_{in} (°C)	h_{in} (kJ.kg ⁻¹)	P (bar)	T_{out} (°C)	h_{out} (kJ.kg ⁻¹)	η_m (%)	W_i (kW)	η_s (%)	W (kW)
453,276	33,852	364,265	10	61,102	386,564	95	3,120	75	4,160
			20	116,206	433,071		9,626		12,835
			30	150,023	462,136		13,692		18,256
			40	174,860	483,576		16,692		22,256
			50	194,648	500,693		19,086		25,448

b) Cálculo das potências de refrigeração

Chillers industriais, geralmente, são sistemas fechados e compactados num único espaço. Estes refrigeradores são constituídos por condensador, evaporador, válvulas de expansão, compressor, bombas de recirculação e sistemas de controlo (temperatura, pressão, etc. A função deste equipamento é de arrefecer um determinado fluido até a temperatura pretendida, para que, posteriormente, o fluido pudesse ser usado numa determinada instalação fabril. Assim, o fluido escoar do *chiller* até ao ponto de aplicação, e de volta para o *chiller*. Em suma, seu funcionamento pode ser descrito de seguinte modo: o fluido a arrefecer entra no evaporador, arrefece permutando o calor com o fluido refrigerante que se encontra a baixas temperaturas, e parte para o ponto de sua aplicação na fábrica. Quanto ao fluido refrigerante, este, aquecendo no evaporador, passa no compressor onde a sua pressão e, conseqüentemente, temperatura aumentam. A seguir, o fluido refrigerante, que nesta etapa se encontra em estado gasoso, passa pelo condensador. Aqui ele condensa, passando para o estado líquido e segue para a válvula de expansão, onde sofre a redução brusca de pressão e, conseqüentemente, de temperatura. Saindo da válvula de expansão agora a baixa temperatura, volta a entrar no evaporador onde arrefece o fluido processual e repete o ciclo. O fluido refrigerante pode ser o ar, água, ou refrigerantes especiais, tais como o mais amplamente utilizado R134a (substituto de Freon).

Para poder determinar as potências de refrigeração necessárias para produzir a solução de etileno-glicol é preciso saber as temperaturas de entrada e saída da solução no *chiller*, o caudal de solução e a potência térmica necessária a permutar.

A temperatura de saída de solução de etileno-glicol do *chiller* é a temperatura de entrada desta solução no condensador do segundo estágio de condensação. Esta temperatura é imposta de forma a conseguir a condensação desejada. Por sua vez, a temperatura de solução de etileno-glicol à entrada do *chiller* é a temperatura de saída desta solução do condensador de segundo estágio de condensação. Esta temperatura determina-se através de um balanço energético ao condensador. Assumiu-se, também, que o caudal da solução é igual ao caudal do actual fluido de refrigeração, RW.

Tabela 7.14. Variáveis de dimensionamento do *chiller* e o respectivo resultado

F_{EG} (kg.h ⁻¹)	T_{EG} (°C)	T_{REG} (°C)	ΔT (°C)	C_{pEG} (kcal.kg ⁻¹ °C ⁻¹)	Q_{calc} (kcal.h ⁻¹)	Q_{proj} (kcal.h ⁻¹)
11000	-10	-6,698	3,302	0,8671	31494,179	37793,014
	-20	-16,439	3,561	0,8666	33944,957	40733,949
	-30	-26,223	3,777	0,8663	35989,592	43187,511

A Tabela 7.14 apresenta os valores das variáveis necessárias para a determinação da potência térmica a permutar na máquina de refrigeração, assim como também os respectivos resultados. F_{EG} é o caudal mássico da solução, T_{EG} é a temperatura de solução à saída do *chiller* e à entrada do condensador do segundo estágio, T_{REG} é a temperatura de solução à saída do condensador do segundo estágio e à entrada no *chiller*, ΔT é a diferença de temperatura da solução de etileno-glicol entre a entra e saída do condensador, e C_{pEG} é capacidade calorífica da solução. Estas variáveis permitem calcular a potência térmica Q_{calc} , necessária a permutar na máquina de refrigeração de solução de etileno-glicol, de seguinte forma:

$$Q_{calc} = F_{EG} \times C_{pEG} \times \Delta T \quad \text{Eq.7.13}$$

No entanto, para efeitos de projecto, decidiu-se sobredimensionar a máquina de refrigeração em 20%. Assim, o Q_{proj} é calculado através da seguinte expressão:

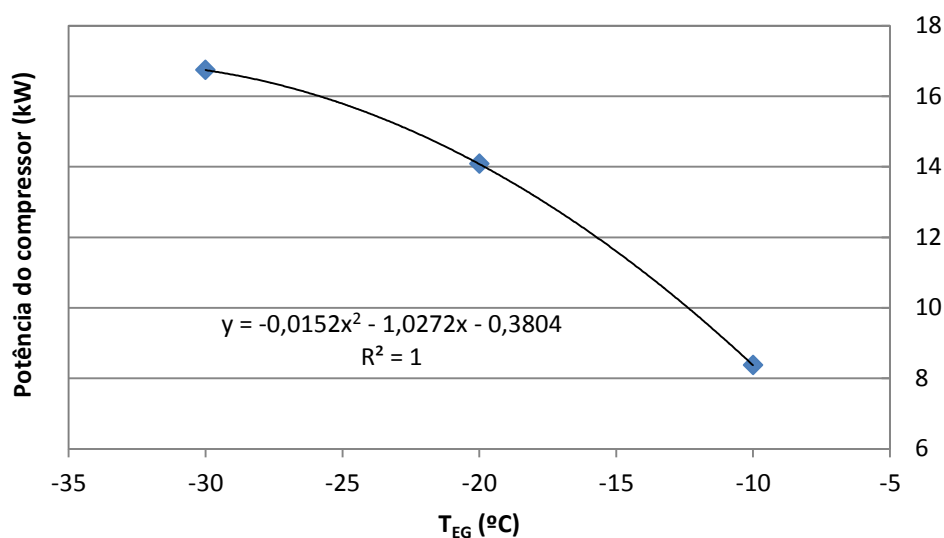
$$Q_{proj} = (0,2 * Q_{calc}) + Q_{calc} \quad \text{Eq.7.14}$$

Tendo-se calculado as potências térmicas para cada um dos três casos, contactou-se uma empresa de construção dos *chillers* com o fim de obter as potências de compressão necessárias para o efeito. É importante saber a potência dos compressores dos *chillers* porque são essas potências que influenciam em grande parte o custo de operação da máquina de refrigeração. A empresa sugeriu os *chillers* com as seguintes potências de compressão patentes na Tabela 7.15.

Tabela 7.15. Proposta de *chillers*

T_{EG} (°C)	-10	-20	-30
W (kW)	8,37	14,08	16,74

Com o fim de obter as potências de compressão para todas as temperaturas da solução estudadas, representou-se as potências aconselhadas em função da temperatura e aproximou-se os dados por um polinómio de segundo grau. Os resultados obtidos encontram-se no gráfico da Figura 7.17, bem como a expressão matemática do respectivo polinómio.

Figura 7.17. Representação das potências de compressão do *chiller* em função de temperatura

Com o auxílio da expressão matemática da linha de tendência, calculou-se as potências de compressão dos *chillers* para restantes temperaturas da solução aquosa de EG. A Tabela 7.16 apresenta os resultados obtidos.

Tabela 7.16. Potências dos compressores de *chillers* (calculadas)

T_{EG} (°C)	-5	-10	-15	-20	-25	-30	-35	-40
W (kW)	4,376	8,372	11,608	14,084	15,800	16,756	16,952	16,388

H. Cálculo dos custos anuais de compressão, refrigeração e da unidade criogénica

Para calcular o custo de operação anual da compressão ou refrigeração é necessário determinar quanto tempo o compressor ou o *chiller* terá que trabalhar durante um ano de produção.

a) Cálculo do tempo de operação anual

Para estimar o tempo de operação anual em horas precisa-se dos dados da Tabela 7.17.

Tabela 7.17. Dados para cálculo do tempo de operação anual

Produção ($\text{ton}_{\text{PVC}} \cdot \text{ano}^{-1}$)	\bar{X} (%)	Preço electricidade ($\text{€} \cdot \text{kWh}^{-1}$)	F_{VCG} ($\text{ton} \cdot \text{h}^{-1}$)
200000	80	0,07	10

O tempo de operação anual depende da produção anual de PVC e da conversão média (\bar{X}) de VCM, visto que é o VCM que se pretende condensar. Usando a definição de conversão média, tem-se que:

$$\bar{X} = \frac{\text{ton}_{\text{PVC}}}{\text{ton}_{\text{VCM}}} \quad \text{Eq.7.15}$$

Usando os valores da Tabela 7.17 obtém-se que a quantidade do monómero gasta anualmente é de $250000 \text{ton}_{\text{VCM}}$. A diferença entre a quantidade de monómero gasto e PVC produzido dá a quantidade de VCM que é preciso recuperar anualmente. A quantidade em questão é de 50000ton de VCM.

Sabe-se, também, que o caudal de VCG que passa pela instalação de condensação do monómero é de $10 \text{ton} \cdot \text{h}^{-1}$. Este caudal é o máximo que os compressores de VCG debitam. Tendo em conta que nos projectos industriais usa-se ano de 350 dias, tratar $10 \text{ton} \cdot \text{h}^{-1}$ significa tratar anualmente seguinte quantidade:

$$10 \frac{\text{ton}_{\text{VCM}}}{\text{h}} \times 350 \frac{\text{dias}}{\text{ano}} \times 24 \frac{\text{h}}{\text{dia}} = 84000 \frac{\text{ton}_{\text{VCM}}}{\text{ano}} \quad \text{Eq.7.16}$$

No entanto, como foi supramencionado, a quantidade de VCM que é necessário de recuperar é de 50000ton . Por esta razão, a unidade de condensação não opera nas condições de capacidade máxima todos os dias. O tempo de operação anual é:

$$\frac{50000 \text{ ton}_{VCM}}{84000 \frac{\text{ton}_{VCM}}{\text{ano}}} = 0,5952 \text{ ano} \quad \text{Eq.7.17}$$

Convertendo o tempo resultante para horas, tem-se:

$$0,5952 \text{ ano} \times 350 \frac{\text{dias}}{\text{ano}} \times 24 \frac{\text{h}}{\text{dia}} = 5000 \text{ h} \quad \text{Eq.7.18}$$

Isto significa que nas condições de capacidade máxima de operação a instalação trabalharia, aproximadamente, 5000h por ano normal de produção.

b) Cálculo do custo de operação de compressão e refrigeração

Tendo calculado o tempo de operação anual do hipotético compressor ou *chiller*, pode-se determinar o custo anual de operação associado a cada um dos equipamentos para diferentes pressões de compressão e temperaturas de refrigeração.

Usando o preço de electricidade da Tabela 7.4, tempo de operação anual calculado anteriormente, e as potências de compressão e refrigeração da Tabela 7.13 e Tabela 7.16, respectivamente, do Apêndice G, calcula-se o custo de operação anual de seguinte forma:

$$\text{Potência(kW)} \times \text{Preço electricidade} \left(\frac{\text{€}}{\text{kWh}} \right) \times \text{Tempo operação(h)} \quad \text{Eq.7.19}$$

Feito o cálculo obtêm-se os custos de operação patentes na Tabela 7.18.

Tabela 7.18. Custos de operação anual de compressão e refrigeração

P_{VCG1} (bar)	CO_{comp} (€.ano ⁻¹)	T_{EG} (°C)	CO_{refrig} (€.ano ⁻¹)
10	1456,000	-5	1531,460
20	4492,250	-10	2930,060
30	6389,600	-15	4062,660
40	7789,600	-20	4929,260
50	8906,800	-25	5529,860
----	----	-30	5864,460
----	----	-35	5933,060

c) Cálculo do caudal de azoto líquido necessário

Para calcular o caudal de azoto necessário para a condensação especificada através da potência térmica a permutar é necessário entender o que acontece com a corrente de azoto dentro do condensador criogénico.

A Tabela 7.19 apresenta as condições da corrente de azoto à entrada do condensador.

Tabela 7.19. Condições de entrada do azoto na unidade de condensação criogénica

T_{in} (°C)	P_{in} (bar)	T_{sat} (°C)	Estado físico	T_{out} (°C)	P_{out} (bar)
-170	10	-167	Líquido	-30	7

Como está patente na tabela de cima, a temperatura de saturação de azoto a 10bar é -167°C. Isto significa que acima desta temperatura azoto é gasoso e abaixo desta é líquido. Levando em conta que o azoto entra a -170°C, conclui-se que este entra em estado líquido. Por sua vez, uma vez que a temperatura de saída especificada para a corrente de azoto é -30, o azoto sai do condensador em estado gasoso.

Com base nesta informação entende-se que o azoto entra em estado líquido, muda de fase libertando o calor latente associado e aquece até -30°C. Assim, o balanço energético associado a esta corrente pode ser expresso por:

$$Q = \lambda \times F_{N_2} + F_{N_2} \times C_{P_{N_2}} \times \Delta T = F_{N_2} (\lambda + C_{P_{N_2}} \times \Delta T) \quad \text{Eq.7.20}$$

onde $(\lambda \times F_{N_2})$ é a energia envolvida na mudança de fase e é igual ao produto do calor latente (λ) de azoto pelo seu caudal mássico F_{N_2} . A parte da equação $(F_{N_2} \times C_{P_{N_2}} \times \Delta T)$ descreve o aquecimento da corrente que se deve ao fenómeno de transferência de calor entre a corrente de azoto e VCG1.

A potência térmica, Q , a permutar durante o processo de condensação no segundo estágio é a Q_{calc} da Tabela 7.14 do Apêndice G, que corresponde a operar com a solução aquosa de EG a -30°C.

Tendo o valor da potência térmica a permutar, estão reunidas todas as condições para calcular o caudal de azoto líquido necessário. Este calcula-se por exprimir a equação Eq.7.20 em ordem a F_{N_2} , tomando a expressão a seguinte forma:

$$F_{N_2} = \frac{Q}{\lambda + C_{P_{N_2}} \times \Delta T} \quad \text{Eq.7.21}$$

O valor do caudal de azoto necessário para o processo calculado é 475,385kg.h⁻¹.

d) Cálculo do custo de operação da criogénica

O custo de operação da unidade de condensação criogénica está intimamente relacionado com o caudal de azoto calculado na alínea anterior e dependerá, em grande parte, do valor deste mesmo caudal devido ao preço de azoto líquido. Tendo em conta que o preço do azoto líquido é 142€.ton⁻¹ e que o tempo de operação anual é de 5000h.ano⁻¹, o custo de operação é calculado de seguinte forma:

$$CO_{crio} = \frac{F_{N_2}}{1000} \times Prc_{N_2} \times t \quad \text{Eq.7.22}$$

onde, Prc_{N_2} é o preço de azoto líquido e t é o tempo de operação anual. Divide-se o caudal de azoto por 1000 para passar o valor desse caudal de kg.h⁻¹ para ton.h⁻¹.

O custo de operação obtido é 337.523,35€.ano⁻¹.

I. Dados auxiliares

Tabela 7.20. Valores típicos dos factores de sujidade²⁰

Fluid	Coefficient ($\text{W/m}^2\text{°C}$)	Factor (resistance) ($\text{m}^2\text{°C/W}$)
River water	3000–12,000	0.0003–0.0001
Sea water	1000–3000	0.001–0.0003
Cooling water (towers)	3000–6000	0.0003–0.00017
Towns water (soft)	3000–5000	0.0003–0.0002
Towns water (hard)	1000–2000	0.001–0.0005
Steam condensate	1500–5000	0.00067–0.0002
Steam (oil free)	4000–10,000	0.0025–0.0001
Steam (oil traces)	2000–5000	0.0005–0.0002
Refrigerated brine	3000–5000	0.0003–0.0002
Air and industrial gases	5000–10,000	0.0002–0.0001
Flue gases	2000–5000	0.0005–0.0002
Organic vapours	5000	0.0002
Organic liquids	5000	0.0002
Light hydrocarbons	5000	0.0002
Heavy hydrocarbons	2000	0.0005
Boiling organics	2500	0.0004
Condensing organics	5000	0.0002
Heat transfer fluids	5000	0.0002
Aqueous salt solutions	3000–5000	0.0003–0.0002

Tabela 7.21. Condutividade térmica de alguns metais²⁰

Metal	Temperature (°C)	k_w ($\text{W/m}^2\text{°C}$)
Aluminium	0	202
	100	206
Brass (70 Cu, 30 Zn)	0	97
	100	104
	400	116
Copper	0	388
	100	378
Nickel	0	62
	212	59
Cupro-nickel (10 per cent Ni)	0–100	45
Monel	0–100	30
Stainless steel (18/8)	0–100	16
Steel	0	45
	100	45
	600	36
Titanium	0–100	16

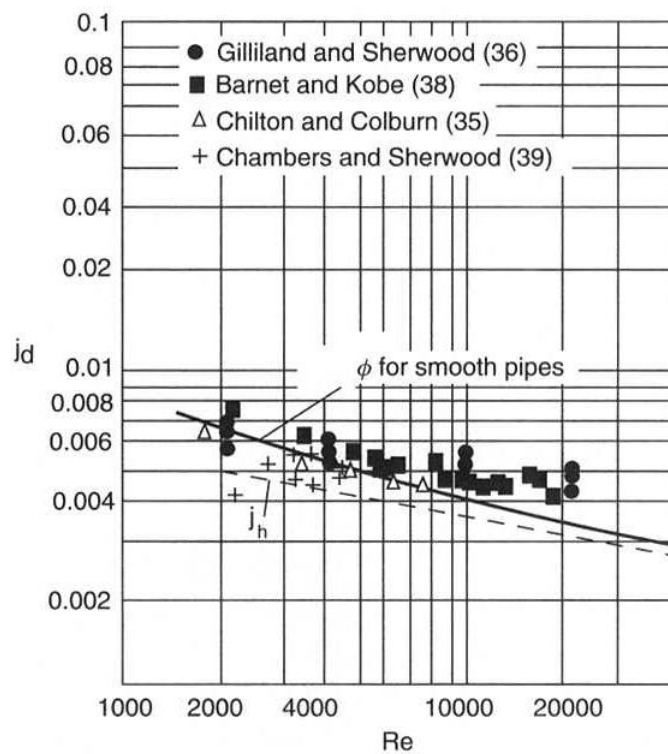


Figura 7.18. Factor de transferência de massa (j_d)¹⁶

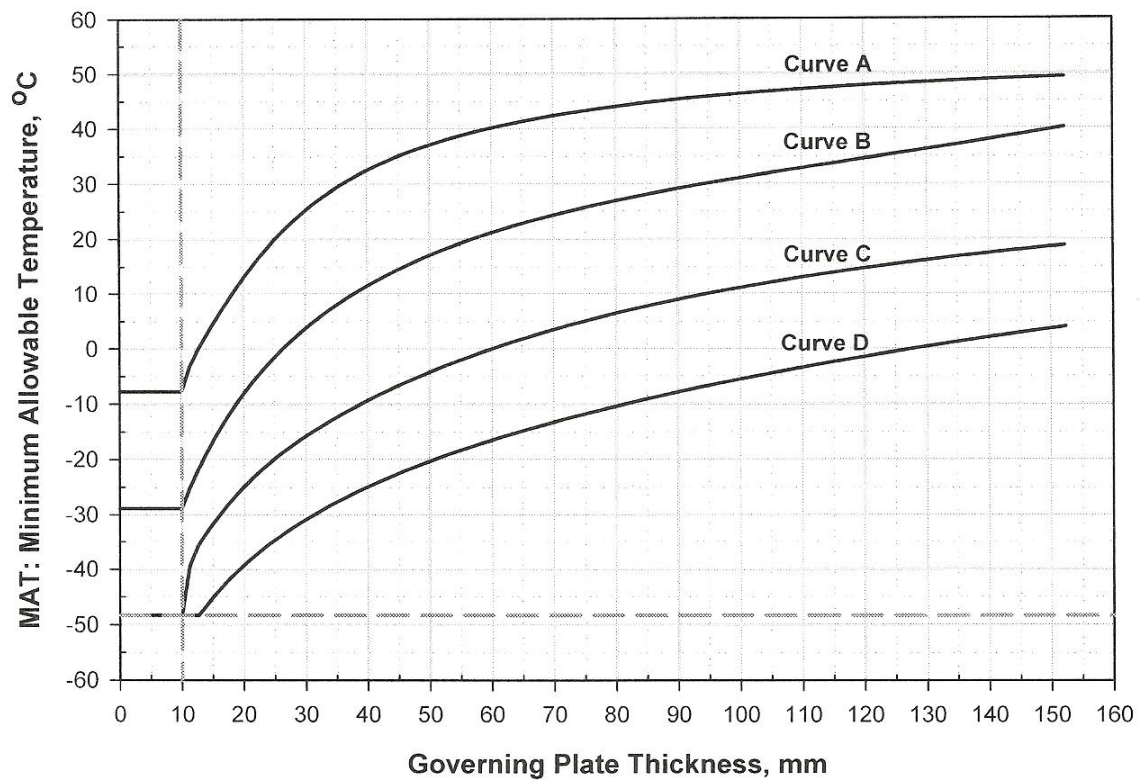


Figura 7.19. Representação gráfica da temperatura de operação mínima em função da espessura de material²⁸

A mesma obra de referência de onde foi tirada a Figura 7.19, classifica o material de construção da carcaça do condensador do segundo estágio (St 37.2) como o material da classe B. Por conseguinte, a temperatura mínima admissível deve ser lida na curva B.

29. Soave-Redlich-Kwong EOS(1972).https://www.e-education.psu.edu/png520/m10_p5.html
(13 Nov 2010).
30. Robert C. Reid, J. M. P., Bruce E. Poling, Appendix A: Property Data Bank. In *The Properties of Gases and Liquids*, 4th ed.; McGraw-Hill, Inc.: New York City, 1987; pp 656-732.